

THÈSE

de cotutelle, pour l'obtention des grades de

**DOCTEUR EN GENIE MECANIQUE DE L'ECOLE DE TECHNOLOGIE
SUPERIEURE (Ph.D)**

et de

**DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE
ET D'AEROTECHNIQUE**

(Diplôme National - Arrêté du 25 mai 2016 Modifié par l'Arrêté du 26 Août 2022)

Ecole Doctorale (Canada) :

Ecole de Technologie Supérieure, Université du Québec, Montréal

Ecole Doctorale (France) :

**MIMME : Mathématiques, Informatique, Matériaux, Mécanique,
Energétique**

Secteur de Recherche :

Mécanique des Solides, des Matériaux, des Structures et des Surfaces

Présentée par :

Rémy SERRE

**CONTRIBUTION AU CALCUL DES EFFETS DE VOISINAGE DANS
LES AGREGATS POLYCRISTALLINS EN COMBINANT LA THEORIE
D'ESHELBY A UNE APPROCHE DE TYPE AUTOMATE CELLULAIRE**

Directrice de thèse : Carole NADOT-MARTIN

Directeur de thèse : Philippe BOCHER

Soutenue le 10 octobre 2024 devant la Commission d'Examen

Version Définitive

JURY

Rapporteurs : M. Stéphane Berbenni, Directeur de recherche, Univ. de Lorraine, Metz
M. Franck Morel, Professeur, Arts et Métiers, Angers

Membres du jury : M. Eric Feulvarch, Professeur, ENISE, Lyon
M. Antoine Tahan, Professeur, ETS, Montréal
M. Azdine Nait-Ali, MCF - HDR, ISAE-ENSMA, Poitiers
Mme. Sophie Dartois, Maître de conférence, Sorbonne Univ., Paris
M. Philippe Bocher, Professeur, ETS, Montréal
Mme. Carole Nadot-Martin, Professeure, ISAE-ENSMA, Poitiers

Remerciements

Une thèse est - bien avant le faste, le diplôme et la recherche - une aventure humaine, et, alors que cette histoire touche à son terme, il me faut ici remercier tout ceux qui firent partie de cette épopée :

A tout seigneur, tout honneur, mes premiers remerciements vont à **Carole Nadot-Martin** et **Philippe Bocher**, mes deux directeurs de thèse, qui m'ont proposé cette thèse, m'ont encouragé, aidé, corrigé, supporté pendant trois ans. Merci à vous deux, merci à toi spécialement Carole, je vous dois beaucoup, sur un plan scientifique évidemment, mais aussi parce que vous avez cru en moi sans faillir.

Merci à **Franck Morel** et **Stéphane Berbenni** d'avoir accepté le rôle de rapporteur pour cette thèse, pour leurs commentaires constructifs et leur dévouement. Merci également à **Eric Feulvarch** d'avoir accepté de présider mon jury de soutenance.

Merci à **Sophie Dartois**, **Antoine Tahan** et **Azdine Nait-Ali** de m'avoir fait l'honneur de juger mon travail et de faire partie de mon jury

Je voudrais aussi avoir un petit mot pour tous les gens que j'ai cotoyés pendant trois ans. J'ai eu la chance de travailler dans deux laboratoires différents et donc de faire pas mal de rencontres et découvrir des personnes formidables. Ma thèse étant, par définition, pas vraiment expérimentale, je n'ai pas pu cotoyer les techniciens et ingénieurs d'essais ailleurs qu'aux pauses. Ceci dit, s'il y a bien une personne à qui j'ai plein de remerciements à faire, c'est **Gérald Saily** qui m'a secouru à chaque crise de panique provoquée par des problèmes informatiques aussi divers que pénibles. Outre le formidable boulot que tu fais, tu es venu à chaque fois que j'avais besoin d'aide et entre les connexions à distances qui ne marchaient pas, les disques durs qui rendent l'âme et autres, la liste est longue ! Je remercie aussi particulièrement **Rémy Bretin** qui a travaillé sur ce sujet avant moi et qui a toujours trouvé le temps de m'aider et de répondre à mes questions. Plus qu'à trouver un autre Rémy pour la thèse suivante. Un merci particulier aussi à **Jean-Baptiste Le Bail**, qui a utilisé mon travail (comme quoi ce que j'ai fait aura servi à quelqu'un !), avec qui on a pu discuter d'Eshelby, de la suprématie de Matlab sur Python et de plein d'autres choses. Merci **Mathieu Calvat** aussi, qui m'a beaucoup appuyé en me générant plein de microstructures puis en m'aidant à créer les miennes. Un merci aussi à **Valérie Picquet**, **Karine Lombard** et **Francine Bayle**, une équipe de choc qui eut fort à faire tant mon statut a soulevé des sourcils et généré de la paperasse... Merci Francine pour les pauses mots-croisés d'ailleurs ! Un grand merci à plusieurs de mes professeurs qui m'ont permis d'arriver jusque là, en l'occurrence et sans exhaustivité : **Louissette Hiriart**, **Max Thébaut**, **Elise Antoine**, **Christophe Desmonts**, **Carole Nadot-Martin**, **Laurence Chocinski**, **Véronique Pelosin**, **Loïc Signor**, **Marianne Beringhier**, **Damien Halm**, **Jean-Claude Grandidier**.

Faire ici une liste exhaustive avec un petit mot pour chaque doctorant des deux labos prendrait une place inconsiderée mais **Vincent, Romain, Loïc, Mélanie, Clément, Jean-Baptiste, Fanny, Marjolaine, Théotime, Antonio, Salvador, Mohsen, Majid, Alain, Yann, Marianne, Mohammad, Anaïs, Quentin, Louise, David, Corentin et tous les autres**, je pense à vous alors que j'écris ces lignes. Je ne cite que les prénoms et sans aucun ordre ou classement, mais en trois ans (hem, un petit peu plus en fait), il s'en est passé des choses. Je suis heureux de tous les bons moments passés, et j'espère qu'il y en aura encore plein d'autres !

Je fais ici un petit aparté. Pendant cette thèse, alors que j'étais à Montréal, qu'il y avait toujours la Covid et qu'on frisait régulièrement les -40 °C, j'ai été amené à (re)fonder un club de jeux de société. Il faut croire que je m'ennuyais. Ce club, dont je suis devenu le premier président est très vite devenu quelque chose de très important pour moi. C'était mon bébé, un exutoire qui me permettait de regagner énergie et motivation. Les débuts furent bien entendu modestes avec 4 valeureux compagnons. Mais rapidement, nous avons commencé à initier des gens aux jeux de société, recruté d'autres membres, nous avons fait des événements de plus en plus importants et quand je suis revenu en France, j'étais triste de partir mais immensément fier du travail accompli. De la même façon, faire un petit mot pour tout le monde serait mérité, revenir sur certains faits "saillants" serait amusant, mais la place manquerait. Alors, **François, Maël, Caroline, Louis, Marie, Victoria, Jérémie, Carmen et les autres**, je voudrais vous dire merci. Le Comité de Jeux de Société a été un véritable refuge contre les turpitudes de la thèse et de l'hiver Canadien.

Je fais ici un autre aparté. Au lecteur qui serait tenté par l'expérience d'une cotutelle avec le Québec, il doit garder à l'esprit qu'il existe deux entités anciennes, puissantes et cruelles, comme les Titans des temps jadis : la Sécurité Sociale Française et la RAMQ québécoise. Il faut rendre à ces dinosaures le même hommage que les chevaliers face à un dragon qu'ils ont vaincu après une lutte acharnée : cela donne à l'aventure un incontestable caractère héroïque. Sans leur présence de tous les instants, la thèse aurait été sans aucun doute moins pénible, moins anxiogène mais également peut-être moins épique.

Je me dois aussi de faire un remerciement au CNIMA, aux stagiaires et aux professeurs avec qui j'ai pu vivre une semaine d'abandon dans la musique, oubliant l'espace d'une (intense) semaine les soucis de la fin de thèse. Ce fut une parenthèse magique uniquement dédiée à l'accordéon. Merci à **Jacques, Nathalie, Appoline, Volodymyr, Jacques, Valère, Madlyn, Alain, Isadora, Maxime... et tous les autres**

Evidemment, ces remerciements ne seraient pas complets si je ne citais pas **Adrien, Justine, Martin, Raphaël, Amélie, Nicolas, Léo, Antoine, Mélanie, Sylvain, Xavier, Dominique, Mathieu, Kenji, Alexia, Pierre-Aym, Gwenn, Damien, Agathe, Clara, Severin, Marion, Margaux... et tous les autres**, avec qui j'ai pu faire du jeu de rôle, du jeu de société, du kendo, de la salsa, de l'accordéon, discuter, râler contre Matlab qui ne comprend rien à mes idées géniales, faire la promotion du goulag, où devraient être envoyés tous mes contradicteurs... faire une thèse, n'implique pas de se faire moine, bien au contraire. On en apprécie que davantage tout ce qui se passe à côté. Vous avez tous contribué, chacun à votre façon, à me rappeler que la thèse est loin d'être le seul horizon visible.

Enfin, je veux remercier ma famille, mes parents notamment, qui m'ont toujours soutenu, aidé, supporté (aussi). Une thèse est parfois compliquée, une cotutelle commencée en période de Covid l'est davantage. Ceux que j'ai cités sauront de quoi je parle. Je n'aurais pas pu continuer ma thèse sans vous. Si j'ai pu atteindre ce niveau c'est grâce à vous. Si j'ai osé tenter la chose, c'est parce que je savais que vous seriez là quoi qu'il arrive. Je vous dois beaucoup.

*Ce travail est également dédié à MM. André Astier, Astor Piazzolla
et Richard Galliano. De grands messieurs de l'accordéon à qui je
dois cette autre passion qui m'accompagne depuis maintenant de
nombreuses années et qui m'a grandement aidée à traverser la thèse.
L'accordéon a trop longtemps souffert d'une image qui l'a desservi
mais c'est un instrument formidable qui ne demande qu'à montrer
l'étendue de son repertoire*

En gros, ça revient à mettre des ronds dans des carrés
Marianne C.

mais du coup, il existe ou pas ton matériau ?
anonyme

Table des matières

1	Introduction	11
2	Contexte et Positionnement de l'étude	14
2.1	L'effet du voisinage : une influence reconnue mais difficile à quantifier . . .	15
2.2	Les principales approches existantes pour le calcul du champ local	17
2.2.1	Les approches en champs complets	17
2.2.1.1	Approche EF pour les polycristaux	18
2.2.1.2	Approche FFT pour les polycristaux	20
2.2.2	L'approche par transformation de champs	21
2.2.3	Les approches en champs moyens	22
2.2.3.1	Schémas linéaires	22
2.2.3.2	Vers l'étude des comportements non-linéaires...	23
2.2.3.3	A propos des distributions de phases	24
2.3	Une approche alternative en élasticité : le modèle de Bretin	25
2.3.1	L'effet de voisinage selon Bretin	25
2.3.2	Les Automates Cellulaires	26
2.3.2.1	Généralités	26
2.3.2.2	Les méthodes de réduction : quel positionnement pour l'Automate Cellulaire ?	28
2.3.3	Description détaillée du modèle de Bretin	30
2.3.3.1	Principe de fonctionnement	30
2.3.3.2	Constitution de la base de données	32
2.3.4	Un outil prometteur...	33
2.3.5	... avec des limites	34
2.4	Positionnement de la thèse et plan du manuscrit	35
3	Construction d'un module de calcul analytique utilisant la théorie d'Eshelby pour remplacer la base de données constituée par EF	37
3.1	Méthode de l'Inclusion Equivalente d'Eshelby (EIM)	38
3.1.1	Théorie générale	38
3.1.2	Expressions détaillées dans le cas sphérique	41
3.1.3	Expressions détaillées dans le cas <i>Prolate</i>	42
3.1.4	Expressions détaillées dans le cas <i>Oblate</i>	43
3.1.5	Premières évaluations	44
3.1.5.1	Cas <i>Prolate</i>	44
3.1.5.2	Cas <i>Oblate</i>	45
3.2	Chargement et Orientation spatiale	47
3.2.1	Chargements étudiés	47

3.2.2	Définition de l'orientation spatiale	47
3.3	Description du modèle EF pour les évaluations	49
3.3.1	Application du chargement	49
3.3.2	Modélisation du milieu infini	49
3.3.3	Définition du maillage	50
3.4	Evaluation du module EIM pour des inclusions isotropes	52
3.4.1	Cas d'une cavité non-orientée	52
3.4.2	Inclusion spatialement orientée	53
3.5	Evaluation du module EIM pour des inclusions anisotropes	55
3.5.1	Prise en compte de l'orientation cristallographique	55
3.5.2	Procédure d'appel du module EIM dans le cas général	57
3.5.3	Confrontation EIM <i>vs</i> EF	58
3.6	Intégration du module EIM dans le modèle de Bretin	60
3.6.1	Rappels sur le modèle de Bretin	60
3.6.2	Remplacement de la base de données par le module EIM	61
3.6.3	Validation	62
3.7	Bilan du chapitre III	66
4	Vers des microstructures plus complexes	67
4.1	Génération de microstructures polycristallines	68
4.1.1	Modèles de Voronoï et de Johnson-Mehl	68
4.1.2	Intégration au sein d'un module de génération	71
4.2	Développement de l'outil GNOME	73
4.2.1	Architecture générale de l'outil GNOME	74
4.2.2	Approximation de la forme des grains	74
4.2.3	Identification des voisins	79
4.3	Sensibilité du GNOME	83
4.3.1	Nombre de grains	83
4.3.2	Influence du Rayon Cadastral	88
4.3.2.1	Influence de \mathcal{R}_c sur le nombre de voisins par grain	88
4.3.2.2	Influence de \mathcal{R}_c sur les variations de contraintes	89
4.3.2.3	Rôle du nombre de voisins sur les grains les plus influencés	92
4.3.2.4	Rôle de la taille relative des grains fortement influencés	92
4.4	Evaluation par confrontation à des simulations en champs complets	93
4.4.1	Mise en place des simulations	93
4.4.2	Comparaisons GNOME / EF pour 4 grains ciblés au coeur de l'agrégat	94
4.4.3	Comparaisons GNOME / EF pour l'ensemble des grains	97
4.5	Bilan du chapitre IV	103
5	Influence de l'effet de voisinage sur les champs locaux	105
5.1	Influence des caractéristiques d'une inclusion isolée sur le champ local	106
5.1.1	Influence de la forme et du rapport de forme	106
5.1.2	Influence de l'orientation spatiale sur la contrainte interne à l'inclusion	107
5.1.3	Influence de l'orientation spatiale de l'inclusion sur le champ local environnement	110
5.2	Généralités sur l'étude des agrégats	113
5.3	Observations sur les morphologies des différents agrégats	115
5.4	Etude de l'acier 316L	118
5.4.1	Distribution d'OC aléatoire en déformation uniaxiale	118
5.4.2	Distribution d'OC aléatoire en glissement simple	122
5.4.3	"Optimisation" d'un voisinage donné	128
5.5	Etude du Titane	133

5.5.1	Distribution d'OC aléatoire <i>vs</i> Distribution de Burgers en déformation uniaxiale	133
5.5.2	Distribution d'OC aléatoire <i>vs</i> Distribution de Burgers en glissement simple	137
5.6	Effet de la présence de carbures	142
5.6.1	Forme, Volume et nombre de voisins	142
5.6.2	Influence du voisinage "granulaire" sur les carbures	145
5.6.3	Influence d'un voisinage "carburé" sur les grains	147
5.7	Bilan du chapitre V	149
6	Conclusions et Perspectives	152
6.1	Rappel et Analyse des principaux résultats	152
6.2	Hypothèses et Limites de l'outil GNOME	154
6.3	Perspectives et Développements futurs	156
7	Annexes	158
A	Détails de calcul - EIM	158
A.1	Sphéroïde <i>Oblate</i>	158
A.1.1	Expression des λ , $\lambda_{,i}$, $\lambda_{,ij}$	158
A.1.2	Expression des $B_{k,i}$, $B_{k,ij}$	159
A.1.3	Expression des $B_{kl,i}$, $B_{kl,ij}$	160
A.2	Sphéroïde <i>Prolate</i>	161
A.2.1	Expression des λ , $\lambda_{,i}$, $\lambda_{,ij}$	161
A.2.2	Expression des $B_{k,i}$, $B_{k,ij}$	161
A.2.3	Expression des $B_{kl,i}$, $B_{kl,ij}$	162
B	Notes sur le positionnement spatial 3D et les relations d'orientation	164
B.1	Construction de la matrice de Rotation	164
B.2	Relations de Kurdjmw-Sachs	166
B.3	Relations de Burgers	167
C	Etude de convergence EF et taille d'élément	168
D	Propriétés Matériau	170
E	Sensibilité de l'outil GNOME au nombre de grains, seconde étude	171
F	Création et insertion d'une seconde phase minoritaire	173
G	Premier développement sur la prise en compte d'une grille de mesure	180
	Liste des Notations	183
	Liste des Figures	189
	Liste des Tableaux	196
	Liste des Algorithmes	198
8	Références Bibliographiques	200
	Résumé	214
	Abstract	216

Introduction

Lorsqu'on étudie un matériau, plusieurs échelles de modélisation doivent être considérées. L'échelle macroscopique correspond à celle de la structure ou de l'éprouvette. Considérons désormais un point de cette éprouvette et agrandissons-le jusqu'à faire apparaître un volume : dans ce volume, d'autres informations sont observables. C'est à cette échelle que naissent les fissures de fatigue par exemple, qui seront à l'origine d'une fissure visible à l'échelle macroscopique - à l'oeil nu - au bout d'un nombre suffisant de cycles de chargement de l'éprouvette. Il est possible d'obtenir des informations sur ces fissures en étudiant le champ local des contraintes.

Le champ local des contraintes dans un polycristal est une donnée complexe à obtenir. Outre une dépendance au chargement appliqué, les propriétés cristallographiques des grains composant le milieu, la présence d'hétérogénéités, les orientations cristallines, la morphologie et l'éventuelle présence de textures influencent à des degrés divers les valeurs locales du champ des contraintes. De ce fait, le calcul du champ local des contraintes a longtemps reposé sur des hypothèses, initialement très contraignantes [Sachs, 1928 ; Taylor, 1938 ; Lin, 1957 ; Kröner, 1961]. Les progrès dans la compréhension du rôle de la microstructure ont permis d'affiner ces hypothèses [Hill, 1965 ; Berveiller & Zaoui, 1979 ; Cailletaud & Pilvin, 1994], et de faire progresser les méthodes d'homogénéisation en champs moyens appliquées aux polycristaux [Voigt, 1889 ; Voigt & Drude, 1889 ; Reuss, 1929 ; Hashin & Shtrickman, 1962a ; Hashin & Shtrickman, 1962b ; Hashin & Shtrickman, 1962c ; Moreau & Berbenni, 2015 ; Phuc Tran, 2018] permettant d'obtenir désormais des indicateurs d'hétérogénéités. De plus, le développement de méthodes de calcul en champ complets ont permis d'obtenir un champ local tenant compte - par construction - de l'ensemble des phénomènes notables à l'échelle des grains. Toutefois, l'usage statistique de ces méthodes se heurte à l'écueil du manque de précision pour l'estimation des effets de voisinage et/ou du temps de calcul trop important. Cela a favorisé la recherche d'approches alternatives tout d'abord dans le cadre de l'élasticité linéaire dans lequel se placent les présents travaux.

Si l'obtention d'un champ local précis - tenant compte par exemple de l'effet des grains voisins - et pouvant être rapidement calculé a de nombreuses applications en contexte industriel, la fatigue a été retenue pour illustrer l'intérêt des présents travaux, dans le cadre d'une collaboration entre l'Institut Pprime (Futuroscope, France) et le Laboratoire d'Optimisation des Procédés de Fabrication Avancés (LOPFA - Montréal, Canada) qui possède une expérience de modélisation des effets de voisinage au sein des polycristaux par une approche alternative aux méthodes en champs complets et une base de données expérimentale étendue sur le sujet. Toutefois, il convient de garder à l'esprit que d'autres applications sont envisageables.

De nombreux mécanismes sont en jeu dans le cadre d'un chargement de fatigue, notamment si celui-ci est proche, ou en-dessous de la limite de fatigue. Pour mieux comprendre les mécanismes gouvernant les causes des premiers stades de la plasticité et ainsi mieux connaître la durée de vie d'une pièce métallique, il faut notamment considérer - à l'échelle microstructurale conduisant à l'amorçage des fissures de fatigue - l'orientation cristallographique des grains, leur morphologie, mais également les informations relatives à leur voisinage. En effet, les voisins d'un grain sont susceptibles de diminuer ou d'augmenter la contrainte locale perçue par celui-ci, et donc de modifier l'emplacement et l'amplitude du maximum local de contrainte... ce qui peut aboutir à une fissuration survenant plus tôt - ou plus tard - et à un endroit inattendu.

L'usage de campagnes de tests expérimentaux est difficilement compatible avec la quantité de tests nécessaires pour être statistiquement représentatif de toutes les possibilités de voisinages offertes par les microstructures réelles. De plus, ces tests sont - par nature - macroscopiques, ce qui rend l'observation des champs locaux - qui sont eux à l'échelle microscopique - ardue, d'autant plus si on veut se placer au coeur de la matière.

Négliger cette problématique peut en outre, conduire à des conséquences catastrophiques, comme le démontra tragiquement l'incident du vol Aloha Airlines 243 en 1988 (figure 1.1). L'avion avait dépassé de près de 10 000 heures la durée de vie qu'on lui avait calculé et une fissure de fatigue apparut et se transforma en fracture en plein vol, entraînant dans les airs la partie supérieure du fuselage ainsi qu'une hôtesse. Miraculeusement, l'avion ne se désintégra pas en vol et parvint à atterrir mais cet événement illustre la réalité des phénomènes de fatigue et l'importance d'en tenir compte.

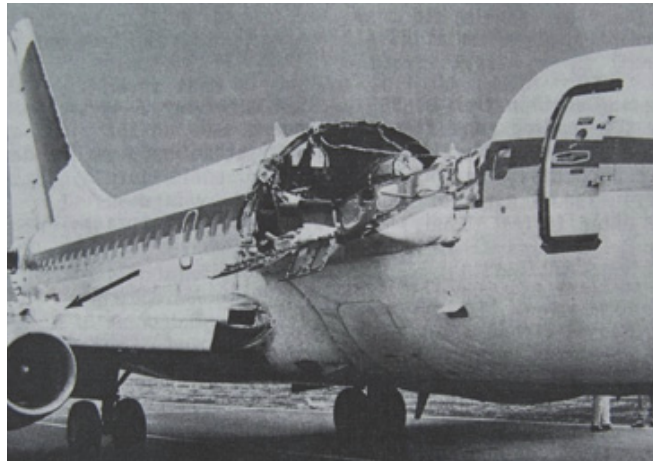


FIGURE 1.1 – Vol Aloha Airlines 243 (Hilo - Honolulu) après "l'incident"

Il existe trois approches principales pour obtenir les champs locaux dans une microstructure donnée :

- * Les approches en champs complets (par exemple, les Elements Finis, [Prakash & Lebensohn, 2009]) offrent l'avantage d'un calcul précis du champ local, tenant compte de toutes les interactions, dont celles du voisinage. Par contre, la modélisation est longue à réaliser et le coût en temps de calcul est incompatible avec le nombre de tests nécessaires pour une approche statistique.

- * Les approches de type NTFA (Non-uniform Transformation Field Analysis, [Michel & Suquet, 2009 ; Adessi et *al.*, 2023]) sont précises et rapides... mais reposent sur des calculs préliminaires effectués par Elements Finis ou FFT.
- * Les approches en champs moyens (par exemple, les méthodes Auto-Cohérentes [Lebensohn et *al.*, 2004]) sont une autre possibilité. Le temps de calcul est compatible avec une approche statistique, toutefois l’effet du voisinage y est souvent minoré, au moins dans les approches les plus classiques, et seules les statistiques des champs locaux accessibles.

Dans le cadre de l’élasticité linéaire, une approche alternative est possible et offre un bon compromis entre précision et rapidité du calcul : le modèle de Bretin, basé sur un Automate Cellulaire (AC) [Bretin et *al.*, 2019a ; Bretin et *al.*, 2019b ; Bretin, 2020].

Ce modèle a généré des résultats prometteurs, mais il a plusieurs faiblesses dont entre autres, le fait de s’appuyer sur une base de données constituée par simulations Elements Finis (EF) et une absence de prise en compte de la morphologie des grains, ce qui réduit la représentativité de la microstructure. La présente thèse vise donc à poursuivre le développement de ce modèle, en le rendant autonome vis-à-vis des Elements Finis et en améliorant la prise en compte de la morphologie de la microstructure. Une fois les nouvelles capacités implémentées et validées, cette évolution du modèle de Bretin sera utilisée pour réaliser une première étude statistique sur la réalité des effets de voisinage dans l’acier 316L et le Titane, sous différentes conditions de chargement.

Cette thèse a été réalisée en co-tutelle entre l’Institut Pprime (Futuroscope, France) et le Laboratoire d’Optimisation des Procédés de Fabrication Avancés (LOPFA - Montréal, Canada) avec pour directeurs de thèse respectifs Carole Nadot-Martin pour la France et Philippe Bocher pour le Canada. Après une période de cinq mois en France, a suivi une période de quinze mois au Canada avant un retour en France pour la fin de la thèse.

Le présent manuscrit est divisé en cinq parties principales en plus de la présente introduction. Le chapitre 2 traite du contexte et du positionnement du modèle de Bretin, notamment les éléments théoriques sur lesquels il est basé avec un focus particulier sur le principe de fonctionnement des Automates Cellulaires. Le chapitre 3 est focalisé sur la Méthode de l’Inclusion Equivalente (EIM) d’Eshelby [Eshelby, 1957 ; Eshelby, 1959 ; Eshelby, 1961] pour une inhomogénéité sphéroïdale isolée dans un milieu infini élastique linéaire isotrope sous chargement uniforme à l’infini. Les cas d’une inhomogénéité isotrope, anisotrope, spatialement orientée par rapport aux directions de chargement sont incorporés dans un module de calcul unique validé à chaque nouvelle fonctionnalité induite. Le module EIM est alors incorporé dans le modèle de Bretin pour s’affranchir des calculs EF. Le chapitre 4 aborde l’évolution du modèle de Bretin depuis la structure de Kelvin vers une microstructure plus complexe et les adaptations réalisées à cet effet. Le chapitre 5 est dédié à l’étude de l’influence des caractéristiques d’une inclusion sur sa contrainte interne et celle de son environnement proche ainsi qu’à une étude statistique se concentrant sur le voisinage des grains les plus chargés dans un agrégat afin de mettre en évidence les caractéristiques communes de ces agrégats et quantifier leur effet sur le maximum local de contrainte. L’introduction d’une seconde population d’hétérogénéités est également évoquée en fin de chapitre. Le chapitre 6 revient sur les principales hypothèses utilisées, les résultats obtenus et les limites du modèle à son stade actuel d’évolution avant de s’ouvrir sur les principales perspectives d’améliorations. Les notations, figures, tableaux et algorithmes sont ensuite listés avant d’aborder les annexes (7) et enfin, les références bibliographiques (8).

Contexte et Positionnement de l'étude

Contents

2.1	L'effet du voisinage : une influence reconnue mais difficile à quantifier	15
2.2	Les principales approches existantes pour le calcul du champ local	17
2.2.1	Les approches en champs complets	17
2.2.2	L'approche par transformation de champs	21
2.2.3	Les approches en champs moyens	22
2.3	Une approche alternative en élasticité : le modèle de Bretin	25
2.3.1	L'effet de voisinage selon Bretin	25
2.3.2	Les Automates Cellulaires	26
2.3.3	Description détaillée du modèle de Bretin	30
2.3.4	Un outil prometteur...	33
2.3.5	... avec des limites	34
2.4	Positionnement de la thèse et plan du manuscrit	35

Cette thèse est basée sur le travail de Rémy Bretin [Bretin et *al.*, 2019a ; Bretin et *al.*, 2019b ; Bretin et *al.*, 2020 ; Bretin, 2020] et est une continuation du travail entamé sur un modèle basé sur une approche Automate Cellulaire, visant à quantifier le rôle de l'orientation cristallographique sur l'effet de voisinage.

Le présent chapitre est organisé comme suit : dans un premier temps, un bref tour d'horizon des études ayant abordé l'effet de voisinage est mené. Si cet effet a une influence reconnue sur le champ local des contraintes dans les grains, il est difficile à quantifier et à modéliser. La majorité des travaux de la littérature le décrit simplement comme une cause de dispersion des résultats.

En second lieu, une présentation des principales méthodes employées pour étudier le champ local est réalisée avec leurs avantages et leurs limites.

En troisième partie sera alors abordée l'alternative que constitue le modèle de Bretin avec sa définition de l'effet de voisinage, son principe de fonctionnement, ses atouts et ses limites propres. Enfin la thèse sera positionnée par rapport à ce contexte et le plan du manuscrit sera alors explicité et justifié.

2.1 L'effet du voisinage : une influence reconnue mais difficile à quantifier

Il est courant dans les modèles macroscopiques de ne considérer l'existence de fissures de fatigue qu'au delà du seuil que constitue la limite de fatigue. Toutefois, au niveau local, ces fissures peuvent être amorcées en deçà de ce seuil [Chapetti et *al.*, 2023], notamment quand la fissure a une taille trop faible pour atteindre les barrières microstructurales [Navarro & De Los Rios, 1987]. A ce stade, la fissure est essentiellement dépendante de paramètres locaux et la microstructure du matériau a une forte influence sur elle [Wang et *al.*, 1991].

En effet, les orientations cristallographiques (OC) mais également la morphologie des grains sont autant de facteurs à l'origine de l'hétérogénéité du champ local, ce qui va influencer la progression de la pointe de fissure. [Simonovski et *al.*, 2006 ; Simonovski & Cizelj, 2009 ; Guilhem et *al.*, 2010] montrent que l'amorçage est influencé par les grains du voisinage. [Przybyla & McDowell, 2010 ; Guilhem et *al.*, 2010] en particulier prouvent que la redistribution des contraintes s'opère sur des groupes de grains, bien plus que sur les grains considérés individuellement et que ces évolutions doivent être étudiées dans un cadre statistique. De ce fait, l'étude de l'amorçage de fissures macroscopique ne se contente pas de la connaissance des orientations cristallographiques des grains pour déterminer l'endroit le plus critique : il faut s'intéresser au voisinage, ce dernier selon qu'il est globalement plus rigide ou plus mou induisant un état de contrainte différent sur le grain qu'il entoure.

[Sauzay, 2006] définit l'effet du voisinage comme la dispersion de valeurs de contraintes pour des grains de même orientation mais entourés de voisins aux orientations cristallographiques différentes du grain qu'ils entourent et variables d'un voisin à l'autre. Par la redistribution des contraintes qu'ils opèrent au niveau du champ local, les grains des différents voisinages sont donc susceptibles de perturber la propagation des fissures courtes [Basseville et *al.*, 2013 ; Basseville et *al.*, 2017]. Toutefois si la fatigue a servi d'accroche utile à cette problématique, les possibilités ouvertes par une meilleure compréhension des champs locaux et des effets de voisinage au moyen de simulations sont bien plus larges : mécanismes de relaxation de contrainte [Sinning, 2004], transition ductile-fragile [Chauve et *al.*, 2017], rugosité de surface [Guilhem et *al.*, 2018] ou encore transformation de phase [Babei et *al.*, 2023] sont des exemples d'exploitations possibles de cette meilleure compréhension.

Par essence, les voisinages de grains regroupent un grand nombre de possibilités d'orientations cristallographiques, de morphologies, de positions relatives qui sont autant de facteurs pouvant influencer la distribution des contraintes locales. Identifier les caractéristiques les plus influentes exige donc un grand nombre de simulations avec à chaque fois une estimation du champ local.

[Cailletaud et *al.*, 2003] abordent les incompatibilités de déformations entre grains voisins. Ils relèvent notamment qu'un grain entouré de voisins peut subir une contrainte bien supérieure à celle calculée quand ce grain est isolé de tout voisinage. Ils notent également que les approches en champs moyens ont du mal à détecter cet écart. Quelques années après, [Sauzay, 2007] reconnaît lui aussi l'influence du voisinage et les difficultés des modèles existants d'évaluation du champ local à en tenir compte. Par des simulations Elements Finis (EF), il tente de quantifier la dispersion des facteurs de Schmid engendrée par la présence de voisins. [Roters et *al.*, 2010b] ajoutent que la progression de la plasticité dans l'agrégat ne dépend pas que de l'orientation cristallographique (OC) des grains voisins mais également de la contrainte que ces derniers génèrent sur le grain qu'ils entourent. Ils en profitent pour introduire un modèle dit de "*grain cluster*" qui se veut une approche intermédiaire entre les champs moyens et la résolution des équations spatiales visant à prendre

en compte les interactions entre voisins pour la propagation des dislocations. [Guilhem et al., 2010] s'intéressent quant à eux à l'influence du voisinage dans l'amorçage des fissures de fatigue sur une surface libre par le biais d'une étude statistique. Il en résulte que la fissuration dépend davantage de l'effet du "*grain cluster*" que de l'OC du grain concerné.

[Pourian et al., 2014] étudient un agrégat de Titane non-texturé composé de cellules hexagonales figurant les grains et comparent avec succès les résultats obtenus par Elements Finis (EF) et par Automate Cellulaire (AC). Ils mettent ainsi en évidence l'effet de l'orientation cristallographique des voisins immédiats sur le champ local dans les grains, mais ils quantifient également l'effet des voisins "lointains" sur le champ local. [Liu et al., 2016] développent eux, une nouvelle méthode pour obtenir l'influence des "*grains cluster*" en utilisant l'équation de Lippman-Schwinger sous forme incrémentale (cette équation servant à réaliser de l'homogénéisation dans un agrégat donné [Yvonnet, 2012]). Cette méthode, appelée "*Self-Consistent Clustering Analysis*" offre un temps de calcul réduit car elle est valable pour toutes les lois de plasticité locale de chaque phase matériau, sans qu'il y ait besoin de réaliser de calibrations supplémentaires ; mais cette méthode reste tributaire de calculs préliminaires que [Liu et al., 2018] tentent ensuite d'optimiser.

[Bretin et al., 2019a ; Bretin et al., 2019b ; Bretin et al., 2020] développent également une nouvelle approche, basée sur Automate Cellulaire et fondée sur une règle locale de transition pour expliquer l'effet des voisins, lequel dépend des OC et des positions relatives respectives du grain et de ses voisins. Cette approche, combinée à la création d'une base de données de configurations élémentaires, permet de générer de grandes séries d'essais numériques visant à mettre en lumière des tendances statistiques. [Hemery et al., 2019] insistent sur le fait que la morphologie des grains et la distribution spatiale des OC ont une influence importante sur la contrainte mécanique : en effet, des interactions complexes à différentes échelles sont induites par l'anisotropie élastique du Titane ' α ' ce qui implique de devoir tenir compte de l'entière de la distribution spatiale des OC. Dans la continuité de ces travaux, [Nait-Ali et al., 2021] s'intéressent aux régions microtexturées dans le Titane par l'utilisation de simulations FFT. Dans ces régions où le voisinage est faiblement désorienté d'un grain par rapport à l'autre, le mouvement des dislocations se trouve facilité, ce qui diminue ainsi la limite élastique - plus la zone texturée étant importante, plus la baisse étant marquée. En plus des OC, la morphologie du *grain cluster* est susceptible d'atténuer ou d'exacerber les tendances observées. Enfin, l'interface entre régions souples et rigides a été dénoncée comme étant une zone critique, faisant émerger pour l'effet de voisinage, la notion de contraste matériau. A noter que si le Titane et ses macrozones constituent un sujet d'étude naturel pour les clusters de grains, des études ont également été conduites sur les aciers austénitiques [Tsekpua et al., 2023].

Enfin, [Echerradi, 2023] s'intéresse à la dispersion de la durée de vie en fatigue HCF et développe un modèle d'évolution pour les polycristaux prenant en compte la plasticité et la rupture. Le modèle est capable de prendre en compte les interactions élastiques entre grains. Si ce modèle est prometteur car tenant compte de l'effet des voisins, seuls les voisinages autour des grains critiques - qui sont volontairement éloignés les uns des autres - sont étudiés, le modèle supposant un couplage négligeable entre les autres grains. De plus, le voisinage est étudié dans le sens où [Echerradi, 2023] observe l'influence du grain critique sur les grains adjacents et non l'influence des grains adjacents sur le grain critique.

Ainsi, l'effet du voisinage et des clusters de grains est une problématique reconnue, dont le champ d'applications va de la fissuration aux transformations de phases. Toutefois, à l'échelle macroscopique, cet effet n'est essentiellement visible que par la dispersion des résultats qu'il engendre : en effet, les voisins exercent une influence au niveau local, très dépendante de l'orientation cristallographique des grains. Ce champ de contrainte local est

difficilement mesurable expérimentalement - ce d'autant plus si l'agrégat est au coeur de la matière. De ce fait, pour étudier l'effet des voisins et pour comprendre les paramètres influençant cet effet de voisinage, il est indispensable d'être en mesure d'estimer au mieux le champ local, ce qui est l'enjeu de la section suivante.

2.2 Les principales approches existantes pour le calcul du champ local

Dans un matériau hétérogène donné, pour accéder au champ local - ou à minima des indicateurs de son hétérogénéité - il est indispensable de connaître la morphologie, la position relative, le comportement mécanique de chacun des constituants. Plusieurs approches existent mais les méthodes en champs complets, les méthodes NTFA et les méthodes en champs moyens figurent parmi les plus utilisées, et se distinguent notamment par leur capacité à reproduire plus ou moins finement la morphologie. Ainsi dans la sous-section 2.2.1 seront introduites les méthodes en champs complets, avec un focus particulier sur les plus utilisées que sont les Elements Finis (sous-section 2.2.1.1) et les transformées de Fourier (sous-section 2.2.1.2). La sous-section 2.2.2 suivante se penche sur l'approche par transformation de champs, qui a été appliquée aux polycristaux assez récemment [Michel & Suquet, 2016]. Enfin, la sous-section 2.2.3 aborde les méthodes en champs moyens, avec un passage incontournable par les schémas linéaires les plus usités (sous-section 2.2.3.1), puis une rapide présentation des modèles non-linéaires - qui fait l'objet de beaucoup de travaux à l'heure actuelle - est effectuée (sous-section 2.2.3.2), avant de conclure par quelques mots sur la distribution de phases (sous-section 2.2.3.3).

2.2.1 Les approches en champs complets

Au cours des dernières décennies, le développement de la puissance de calcul a permis l'émergence des approches en champs complets pour reproduire le comportement mécanique à une échelle et un degré de détail difficilement accessibles expérimentalement [Rotters et al., 2010]. Les approches en champs complets, tels que les Elements Finis (EF) ou encore les Transformées de Fourier Rapides (FFT) sont actuellement les méthodes les plus précises dans la description des champs micromécaniques. Ces méthodes peuvent se baser sur une description riche de la microstructure, laquelle a pu être obtenue expérimentalement (tomographie), générée numériquement (agrégats de Voronoï etc., voir chapitre 4, section 4.1), ou une combinaison des deux (reconstruction à partir de tranches de matériau scannées par EBSD). Les méthodes en champs complets permettent alors d'accéder aux champs locaux (de contrainte notamment) et aux statistiques de champs aidant ainsi à la compréhension des mécanismes de déformation en complément des expériences (mesures de champs).

Les approches en champs complets se sont donc imposées comme incontournables pour étudier l'effet des voisins, mais c'est loin d'être leur seule utilité car leur champ d'application est extrêmement diversifié : ainsi [Jayachandran et al., 2009] s'intéressent par exemple au couplage de la modélisation mécanique et piézoélectrique par des simulations en champs complets, ainsi qu'à l'influence de l'orientation cristallographique et des textures des grains sur les propriétés électromécaniques macroscopiques. [Furstoss et al., 2021] quant à eux travaillent sur des polycristaux dans le cadre des géosciences. Ils cherchent à modéliser la croissance des grains et reproduire en particulier les structures transitoires et stables. Les simulations en champs complets doivent permettre alors de réaliser un modèle en champs moyens pertinent. [Carroll et al., 2012] introduisent une cavité dans un polycristal et étudient en particulier le rôle de la microstructure locale sur l'évolution de ce vide en plasticité cristalline. Les effets de la microstructure locale sont d'autant plus importants

que le trou est petit, une cavité ponctuelle ayant pour conséquence que la localisation de la déformation est confinée dans le grain contenant la cavité. A noter toutefois que [Carroll et *al.*, 2012] utilisent également de la corrélation d'image (DIC) et ont donc aussi une approche expérimentale et 2D.

[Prakash & Lebensohn, 2009] comparent deux approches en champs complets, la Méthode des Elements Finis (MEF) et la FFT lors de la prédiction du comportement micromécanique des polycristaux dans le cadre de la viscoplasticité. Les performances de calculs sont ainsi examinées mais également l'hétérogénéité inter- et intragranulaire, d'abord pour un aluminium laminé, puis dans le cadre du tréfilage du tungstène. D'autres utilisent la puissance de calcul offerte par les méthodes en champs complets pour estimer les propriétés effectives et les statistiques de champs en vue d'évaluer l'écart par rapport aux résultats fournis par les méthodes en champs moyens (sous-section 2.2.3), ce qui oblige à déterminer la taille optimale d'un agrégat pour l'obtention de données effectives pertinentes. Les travaux de [Kanit et *al.*, 2003] sont à cet égard pionniers pour ce qui est de la détermination d'un Volume Elementaire Représentatif (VER) avec une approche statistique associant la taille du VER au nombre de réalisations et à la précision souhaitée quant à la grandeur effective à estimer. [Yang et *al.*, 2019] ont, eux, repris et approfondis les travaux de [Kanit et *al.*, 2003] sur la taille des volume élémentaires représentatifs dans les polycristaux en l'étendant au cadre de la viscoplasticité quand [Kanit et *al.*, 2003] se cantonnaient à l'élasticité linéaire pour un agrégat de Voronoï biphasé. Toutefois, le grand nombre de degrés de liberté considérés et les problèmes de maillage (pour les EF) impliquent un coût de calcul très élevé [Djaka, 2017; Djaka et *al.*, 2018]. Cette contrainte restreint également l'intérêt des approches en champs complets pour obtenir des informations sur de grandes séries de simulations et les traitements statistiques subséquents.

2.2.1.1 Approche EF pour les polycristaux

Dès lors qu'on veut estimer les champs locaux dans les polycristaux *via* des simulations champs complets par Elements Finis, il convient de souligner les travaux pionniers de [Mika & Dawson, 1998] et de [Barbe, 2001]. Depuis, l'utilisation des Elements Finis sur ce domaine d'étude s'est faite exponentielle [Proudhon et *al.*, 2010; Proudhon et *al.*, 2016; Ayadi, 2017; Fressengas & Upadhyay, 2020; Phalke, 2022] en raison de la précision offerte par cette méthode de calcul et de l'augmentation des puissances de calcul disponibles.

Avec un arrière-plan matériau et procédés [Jeon et *al.*, 2023] par exemple, créent un modèle polycrystallin élasto-visco-plastique par EF pour simuler la flexion trois-points d'un alliage de magnésium et démontrent que la texture cristallographique joue un rôle majeur dans le déplacement de la fibre neutre. A une échelle beaucoup plus microscopique, [Renversade & Quey, 2023] discrétisent les grains en des centaines d'éléments pour avoir accès aux distributions d'orientations cristallographiques à l'intérieur de chaque grain et observer l'évolution des axes de désorientation préférentiels avec la déformation. Ils montrent en particulier qu'en plasticité cristalline, l'axe de désorientation préférentiel pour les systèmes de glissement est bien pris en compte par leurs simulations.

Il convient cependant de noter que si l'effet de voisinage est un enjeu connu, il est souvent présenté comme une cause de la dispersion des résultats dans la littérature scientifique et peu d'articles à l'exception notable de [Guilhem et *al.*, 2010; Bretin et *al.*, 2019a] cherchent à le modéliser explicitement avec des méthodes en champs complets. De plus, le maillage d'un ou plusieurs polycristaux et la réalisation des études de convergence associées ont un coût en calcul élevé qui rendent les EF inadaptés à la résolution de multiples simulations en vue d'une étude statistique, même si ces simulations sont réalisées sur des configurations limitées n'impliquant qu'un seul grain d'intérêt et son voisinage.

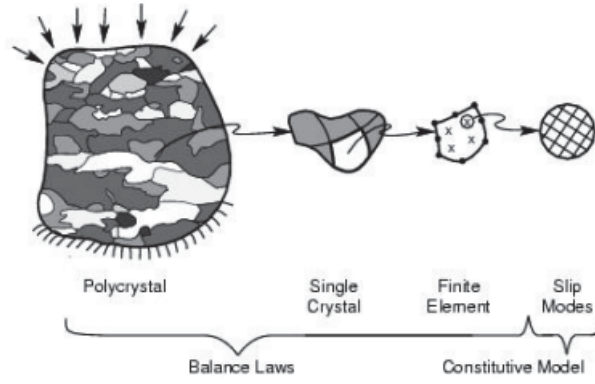


FIGURE 2.1 – Représentation schématique d’un polycristal soumis à un chargement quelconque, et de sa discrétisation en cristaux définis en propre par EF (figure extraite de [Dawson & Boyce, 2018]). A noter que le schéma montre quelques éléments par cristal seulement, mais ce nombre est généralement bien plus élevé

Sur la figure 2.1, le polycristal est subdivisé en cristaux individuels qui remplissent entièrement le domaine d’étude. Les interfaces entre cristaux sont cohésives : il n’y a ni glissement ni séparation. Chaque cristal est discrétisé par au moins 1 élément (souvent plus). Le champ local est alors évalué aux points d’intégration grâce au comportement du cristal dans lequel le point se trouve. Le chargement est, lui, appliqué aux frontières du domaine d’étude (*i.e.* du polycristal) avec les conditions aux limites appropriées [Dawson & Boyce, 2018]. L’approche EF est riche et permet des modélisations pouvant atteindre de forts degrés de complexité. Ces dernières, malgré un temps de calcul élevé, permettent ainsi de reproduire des phénomènes locaux complexes. Ainsi, [Jayachandran et *al.*, 2009] réalisent une homogénéisation mathématique d’un matériau piezoélectrique par Elements Finis, utilisant la méthode en champs complets pour résoudre le système d’équations permettant l’équilibre électrique et mécanique. [Furstoss et *al.*, 2021] utilisent quant à eux une approche de plasticité cristalline (CPFEM, couplant la description mécanique et une formulation vitesse-pression) pour prendre en compte le mouvement des joints de grains et la recristallisation dynamique *via* une description implicite du polycristal par une approche *level-set*. [Jeon et *al.*, 2023] étudient pour leur part un alliage de magnésium à l’aide d’un modèle élasto-visco-plastique de polycristal (Δ EVPC-FE) comprenant une loi d’écrouissage empirique (Voce). Ce modèle - complet mais lourd - a été comparé avec succès aux résultats expérimentaux, démontrant encore s’il était besoin la pertinence de l’approche EF pour modéliser des phénomènes microstructuraux complexes. [Renversade & Quey, 2023] ont recréé numériquement par EF un agrégat polycristallin de 466 grains grâce à un scan DCT (Diffraction Contrast Tomography). L’agrégat a été recréé grâce à une tessellation de Laguerre (chapitre 4, section 4.1), chaque grain étant approximé par la géométrie convexe la plus représentative d’un point de vue morphologique. L’intérieur de chaque grain a reçu ensuite un maillage fin et des lois d’évolution plastique permettant de reproduire les phénomènes intragranulaires qui débutent lorsqu’on quitte le domaine élastique linéaire. [Kanit et *al.*, 2003] ont également généré un agrégat numérique 3D, (à partir eux d’une tessellation de Voronoï, voir chapitre 4, section 4.1) dans un domaine d’étude cubique et de nature biphasée. Différentes tailles du domaine d’étude ont été étudiées et si le comportement mécanique est resté élastique linéaire, la conductivité thermique a été examinée dans les simulations. [Yang et *al.*, 2019] se sont basés, eux, sur un agrégat de Voronoï s’affranchissant de la forme cubique du domaine d’étude (génératrice de concentrations de contraintes faussant le champ local aux bords du domaine) et morphologiquement périodique, généré par Neper [Quey et *al.*, 2011]. Cet agrégat a de plus été doté d’un modèle de plasticité cristalline.

2.2.1.2 Approche FFT pour les polycristaux

Dans leur principe de fonctionnement, les Transformées de Fourier Rapides (Fast Fourier Transforms) visent à transférer une équation intégrale de type Lippman-Schwinger [Yvonnet, 2012] dans l'espace de Fourier où le problème sera décomposé en un système non-linéaire plus aisément résoluble avant que les solutions ne soient retransférées dans l'espace réel. Originellement développées par Moulinec et Suquet [Moulinec & Suquet, 1994; Moulinec & Suquet, 1998] pour les matériaux composites fibreux, Lebensohn [Lebensohn, 2001] a adapté la méthode FFT pour les polycristaux ce qui a ouvert la voie à une large utilisation de celle-ci [Grennerat, 2006; Belkhabbaz et al., 2011; Djaka, 2017; Djaka et al., 2018; Marano, 2019]. Par rapport aux Elements Finis, la formulation FFT possède un coût de calcul bien moins élevé, en bonne partie parce qu'elle ne nécessite pas de maillage (la microstructure est discrétisée en voxels dans lesquels les lois constitutives sont résolues jusqu'à convergence des champs locaux). Toutefois les forts gradients de contraintes (ou le besoin de détecter de faibles variations de contrainte/déformation sur tout le volume dans notre cas, l'effet du voisinage restant un phénomène très local) amèneront à exiger une très grande densité de voxels qui pénalise le temps de calcul.

Si pour un polycristal, les propriétés élastiques varient localement (du moins leur projection du fait des OC différentes d'un grain à l'autre), la formulation FFT propose une formulation avec des propriétés dites "auxiliaires" uniformes [Moulinec & Suquet, 1994] :

$$\begin{cases} \sigma_{ij} &= \mathbb{C}_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl} + \tau_{ij} \\ \sigma_{ij,j} &= 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

Où σ et ε sont respectivement les tenseurs de contrainte et de déformation locaux, \mathbb{C}^0 le tenseur de rigidité du milieu global macroscopiquement homogène. τ est le champ de polarisation [Klöcker et al., 1998]. Il peut être physiquement interprété comme une pré-contrainte ou la conséquence d'une déformation libre (causée par une dilatation thermique ou autre) et il est défini par :

$$\tau_{ij}(x) = (\mathbb{C}_{ijkl}(x) - \mathbb{C}_{ijkl}^0) \varepsilon_{kl}(x) \quad (2.2)$$

$\mathbb{C}(x)$ étant le tenseur de rigidité au point de calcul x . La solution à l'équation 2.1 étant donnée par :

$$d\varepsilon_{ij}(x) = - \int_{\Omega} \Gamma_{ijkl}^0(x - x') \tau_{kl}(x') dx' \quad (2.3)$$

Avec $d\varepsilon_{ij}(x) = \varepsilon_{ij}(x) - E_{ij}$ le champ local ôté de sa composante moyenne (on parle aussi de fluctuation locale de déformation), Γ^0 étant l'opérateur périodique de Green associé au tenseur \mathbb{C}^0 dans le domaine Ω où est défini le milieu. L'équation 2.3 est résolue dans l'espace de Fourier où elle s'exprime alors tel que :

$$d\hat{\varepsilon}_{ij}(\xi) = -\hat{\Gamma}_{ijkl}^0(\xi) \hat{\tau}_{kl}(\xi) \quad (2.4)$$

Avec ξ , un point dans l'espace de Fourier (les variables et fonctions dans l'espace de Fourier sont distinguées par l'attribut $\hat{\cdot}$). Si la résolution de cette équation est relativement aisée, la transformée inverse vers l'espace réel est elle plus complexe et est à l'origine de la majorité du cout de calcul.

Si l'approche FFT est plus récente que l'approche EF, elle n'a pas tardé à prouver sa pertinence pour l'étude des champs locaux dans les polycristaux, y compris vis-à-vis des

EF. [Grennerat, 2006] a ainsi reconstruit un agrégat polycristallin à partir de microstructures expérimentales et a simulé son comportement élasto-visco-plastique en démontrant par comparaison à des mesures par corrélation d’images numériques (Digital Image Correlation, DIC) que les zones de localisation de la déformation étaient obtenues aux mêmes endroits avec la même amplitude.

[Prakash & Lebensohn, 2009], eux, ont comparé l’approche EF et l’approche FFT dans la description du champ local avec, pour les deux approches, la même loi visco-plastique cristalline dans le but de mettre en évidence le temps de calcul bien plus faible de la FFT pour une précision comparable. Un milieu périodique à 100 grains a été considéré avec une discrétisation de 32 voxels de côté et une moyenne de 2600 points de Gauss par grains - la densité de ces derniers étant reliée à la précision du résultat. [Belkhabbaz et al., 2011] ont voulu prédire le comportement effectif d’un polycristal d’acier austénitique 304L par l’approche FFT, en utilisant une image numérique produite par corrélation tomographique numérique (DCT). Ils ont pu ainsi reproduire le comportement élasto-plastique de l’agrégat et ils ont comparé ces résultats aux estimations fournies par l’approche Auto-Cohérente (sous-section 2.2.3). [Djaka, 2017] rappelait la sensibilité de l’approche FFT au contraste mécanique [Eyre & Milton, 1999] ainsi que la faiblesse des approches FFT dans le calcul local à proximité de discontinuités (défauts, joints de grain, fort contraste mécanique local...) qui tendent à générer des oscillations numériques. Il s’est donc attaché à développer le calcul FFT dans le cadre de la dynamique des dislocations afin d’obtenir un champ local tenant compte des dislocations sans être pollué par des artefacts numériques. [Marano, 2019] a également utilisé la FFT pour réaliser de l’homogénéisation mais aussi de la localisation intragranulaire, ses travaux visant à développer un solveur FFT (AMITEX-FFTP, fruit d’une collaboration entre le CEA et le SRMA) destiné à des modèles prédictifs et d’homogénéisation. [Lebensohn et al., 2020] enfin, ont étudié la dispersion de la viscosité d’un polycristal pour différents maillages (de 64 voxels de côté à 512 voxels de côté) par rapport à sa valeur théorique. Ils ont utilisé ensuite un agrégat de Voronoï pour comparer les méthodes en champs moyens à la référence FFT, toujours en plasticité cristalline. Ils mettent ainsi en évidence que contrairement aux méthodes en champs moyens, l’approche FFT, qui tient compte des informations topologiques et des interactions entre les grains peut reproduire certaines caractéristiques du champ local dues à l’influence des voisins.

2.2.2 L’approche par transformation de champs

Exigeant moins de variables que les approches en champs complets, les méthodes de transformations de champs se basent sur la décomposition de variables internes du champ local en une réduction basée sur les modes pour obtenir une réponse effective globale.

L’Analyse de Transformation de Champs (Transformation Field Analysis, TFA) [Dvorak, 1992] a été une tentative pionnière pour obtenir un champ local en plasticité en considérant l’uniformité par phase des déformations plastiques. Ce modèle a ensuite continué d’être développé par [Dvorak et al., 1994], étendu aux structures périodiques avec [Fish et al., 1997] et intégré avec succès dans des calculs de structure [Dvorak et al., 1994, Fish & Yu, 2002; Kattan & Voyiadjis, 1993]. Toutefois cette hypothèse d’uniformité par morceaux reste faiblement réaliste et conduit à une approximation trop rigide du comportement réel, même en augmentant le nombre de domaines où l’approximation est définie [El Abdi, 2021].

Cette limite a motivé les travaux de [Michel et al., 2000; Michel & Suquet, 2003] où les déformations plastiques de chaque phase sont décomposées en une combinaison de champs plastiques non-uniformes. Des lois d’évolutions approximées pour ces variables ont été proposées par [Michel & Suquet, 2003; Michel & Suquet, 2009]. Le modèle a

d'abord été appliqué à des cas 2D [Michel & Suquet, 2003], puis 3D [Fritzen & Böhlke, 2010] et étendu aux phases subissant du vieillissement [Largenton et *al.*, 2014]. Enfin, les variables internes ont été rattachés à une formulation variationnelle incrémentale mixte [Fritzen & Leuschner, 2013]. Toutefois, tous les modèles de NTFA exigent des calculs de modes "off-line" (sous-section 2.3.2.2) des champs locaux par des méthodes en champs complets, ce qui limite le gain en temps de calcul, même si ces calculs ne sont réalisés qu'une fois [Largenton et *al.*, 2019].

Une fois cette "calibration" terminée, l'approche NTFA permet d'obtenir un champ local aussi précis qu'un calcul en champs complets pour un temps de calcul moindre, y compris dans un cadre élasto-visco-plastique. [Michel & Suquet, 2016] sont les premiers à étendre la NTFA aux polycristaux. Les champs locaux des variables internes sont décomposés sur une base réduite de modes et l'approximation de la tangente au second ordre (TSO) est utilisée. Le modèle est alors évalué vis-à-vis de simulations en champs complets sur le fluage de la glace polycristalline et sur le chargement cyclique d'un agrégat de cuivre polycristallin. L'accord entre les deux approches est démontré et le temps de calcul de l'approche NTFA est environ deux ordres de grandeur inférieur vis-à-vis des simulations EF. [Michel & Suquet, 2017] veulent ensuite estimer les potentiels effectifs dans les polycristaux non-linéaires régis par deux potentiels. L'objectif est ici d'utiliser des informations statistiques sur les champs pour améliorer l'approximation de la tangente du second ordre. [Labat et *al.*, 2022] cherchent quant à eux à modéliser au niveau micromécanique le comportement élasto-visco-plastique du dioxyde d'uranium (UO_2) qui est une céramique polycristalline. Le modèle NTFA d'ordre réduit permet alors de considérer deux approches pour l'écrouissage. Il montre ainsi que le modèle réduit est en accord avec les simulations FFT tant au niveau macroscopique que local, et les deux modèles sont également en accord avec les résultats expérimentaux.

2.2.3 Les approches en champs moyens

Les approches en champs moyens ont été initialement développées pour obtenir des propriétés effectives d'un matériau pouvant être très hétérogène dans un premier temps dans le cadre de la thermo-élasticité linéaire, puis étendu dans un contexte de comportement non-linéaire. Si les modèles en champs complets permettent de mieux prendre en compte la réalité microstructurale, le coût en calcul limité des modèles en champs moyens, fondés sur des approximations, en font une alternative intéressante. En revanche, le champ local n'est pas décrit explicitement mais quantifié par des descripteurs statistiques dans chaque phase. Ainsi, les influences locales, tel que l'effet de la déformation d'un grain adjacent sur le grain étudié, la présence de texture, la plasticité ou une forte anisotropie de comportement des grains, auront du mal à être restitués de manière précise, le champ local n'étant pas accessible en tout point mais seulement connu par un nombre limité de grandeurs statistiques. Ceci diminue l'intérêt de cette approche lorsque qu'on étudie des fluctuations très localisées du champ local [Segurado et *al.*, 2002 ; Saby, 2014 ; Phuc Tran, 2018].

2.2.3.1 Schémas linéaires

En élasticité linéaire isotrope, les approximations de Voigt [Voigt, 1889a ; Voigt, 1889b ; Voigt & Drude, 1889] et Reuss [Reuss, 1929] constituent les premières approches pour estimer le comportement effectif des matériaux. Bien que très fortes et peu réalistes, les hypothèses utilisées par Voigt (uniformité des déformations, conduisant à une approximation par excès du tenseur de rigidité effectif) et Reuss (uniformité des contraintes, conduisant à une approximation par excès du tenseur des souplesses effectives) restent utiles car elles permettent d'encadrer le comportement effectif et en fournissent une première évaluation.

Hashin et Shtrickman [Hashin & Shtrickman, 1962a ; Hashin & Shtrickman, 1962b ; Hashin & Shtrickman, 1962c] cherchent à se focaliser sur les hétérogénéités interphases induites par la présence de plusieurs phases, en négligeant les fluctuations intraphases. L'estimation du tenseur des modules effectifs de Hashin et Shtrickman \mathbb{C}^{HS} est la meilleure estimation analytique possible avec des polarisations uniformes par phase. Ce tenseur dépend du milieu de référence choisi (et de son tenseur de rigidité associé \mathbb{C}^0) et de la microstructure [Bornert et al., 2001].

L'utilisation de polarisations homogènes par phase entraîne des fluctuations intraphases du fait de l'influence des polarisations des phases voisines. La loi de comportement pour une phase donnée est satisfaite en moyenne mais pas en tout point. Néanmoins, l'estimation de Hashin et Shtrickman permet d'avoir accès au premier et second moments du champ local intraphase [Bornert et al., 2001]. A partir de cette estimation, il est possible de construire deux estimations distinctes selon les hypothèses choisies pour le milieu de référence : l'estimation de *Mori et Tanaka*, inadaptée aux polycristaux [Mori & Tanaka, 1973 ; Bornert et al., 2001 ; Dushlbauer et al., 2005 ; Zhang & Wang, 2014] et l'estimation *Auto-Cohérente*.

Dans l'estimation Auto-Cohérente¹, le choix du milieu de référence vise à minimiser l'écart entre les bornes de l'énergie potentielle. Si cet écart est nul, alors l'estimation de Hashin et Shtrickman devient égale au comportement effectif du matériau. Le but de cette estimation est de travailler sur la compensation des termes complémentaires : pour créer ce milieu de référence "idéal", l'estimation Auto-Cohérente devrait s'inspirer du milieu effectif lui-même, mais ses modules sont inconnus [Hill, 1965b ; Berveiller & Zaoui, 1979 ; Bornert et al., 2001 ; Yaguchi & Busso, 2004 ; Lebensohn et al., 2004 ; Mareau & Berbenni, 2015]. Le modèle Auto-Cohérent va donc choisir comme milieu de référence, un milieu tel que l'estimation de Hashin et Shtrickman donne à partir de celui-ci, le même résultat [Bornert et al., 2001]. Cette modélisation revient à dire que chaque phase se déforme en moyenne comme une inclusion de même module noyée dans un milieu infini ayant les propriétés du milieu effectif et soumis au même chargement macroscopique à l'infini². Toutefois, le modèle possède des limites [Thorel et al., 1996 ; Gilormini, 1997 ; Lorrain, 2004 ; Bardella, 2012] et ne permet pas d'obtenir l'information du champ local en tout point, même en raffinant la notion de phase.

2.2.3.2 Vers l'étude des comportements non-linéaires...

La description des approches en champs moyens effectuée dans les paragraphes précédents suppose un cadre linéaire, "facilement" prédictible par quelques descripteurs statistiques judicieusement choisis. Toutefois le besoin de pouvoir simuler des comportements non-linéaires des phases constituant le matériau étudié a très vite impliqué de développer un nouveau concept permettant de transformer le problème non linéaire en un problème linéaire que l'on sait résoudre par un schéma linéaire adapté à la microstructure du matériau étudié. C'est la notion de Composite Linéaire de Comparaison (LCC) introduite par [Ponte Castaneda, 1991]. Le comportement non linéaire des phases est ainsi linéarisé en se fondant sur des descripteurs statistiques des champs mécaniques dans chaque phase pour définir le LCC. De nos jours, les propriétés linéarisées des phases du LCC sont définies de sorte à approcher au mieux le comportement non-linéaire selon certains principes variationnels tenant compte des fluctuations intraphases.

1. au sens de Hashin et Shtrickman. Il existe d'autres formulations Auto-Cohérentes, au sens de Hill notamment, qui sont équivalentes tant que les différences de propriétés entre les différentes phases ne sont pas extrêmes [Lorrain, 2004]

2. une idée que l'on retrouvera ensuite dans le modèle de Bretin et son successeur développé dans cette thèse

Les phénomènes non-linéaires, réversibles ou non, impliquent des couplages entre différents mécanismes - certains dissipatifs, d'autres non - décrits par des potentiels thermodynamiques (énergie libre pour les mécanismes conservatifs, potentiel de dissipation pour les mécanismes dissipatifs). Les travaux de [Lahellec & Suquet, 2007] sont à cet égard pionniers, le couplage permettant de mieux prendre en compte l'historique du chargement.

La réponse du LCC à un chargement élasto-visco-plastique est par nature linéaire et viscoélastique. Deux grandes familles d'approches sont alors utilisées : les approches directes, et les approches variationnelles. Les approches directes se basent sur un principe de correspondance décrit notamment par [Mercier et *al.*, 2012 ; Berbenni et *al.*, 2015 ; Czarnota et *al.*, 2015]. Toutefois, le point d'achoppement de ces approches réside dans l'estimation des fluctuations intraphases, où il n'existe de résultats généraux que pour quelques configurations spécifiques. Les approches variationnelles elles, cherchent à réduire le nombre de variables internes utilisées pour le comportement effectif du LCC, d'un ensemble initialement infini en un ensemble fini. Elles sont aptes à fournir les fluctuations. On pourra notamment citer les travaux de [Lahellec & Suquet, 2007 ; Lahellec & Suquet, 2013 ; Agoras et *al.*, 2016 ; Tressou et *al.*, 2018 ; Lucchetta et *al.*, 2019 ; Idiart et *al.*, 2020a ; Idiart et *al.*, 2020b ; Lahellec et *al.*, 2021 ; Tressou et *al.*, 2023]. Toutefois, la réponse à certains historiques de chargement ne peut être correctement reproduite.

2.2.3.3 A propos des distributions de phases

L'approche de Hashin et Shtrickman (sous-section 2.2.3.1) est valable pour tout matériau possédant une distribution de phase isotrope. Cette approche a rapidement été considérée comme trop générale, et [Willis, 1977] a réalisé une première approche tenant compte de la morphologie des phases et de leur distribution spatiale, supposée indépendante. Cette distribution spatiale des phases fait toujours l'objet de travaux, notamment de [Cruz-Gonzalez et *al.*, 2024] qui ont cherché une approche originale, sur base d'images représentatives de la microstructure pour calibrer cette distribution, qui autrement est généralement réduite au schéma de Mori-Tanaka [Mori & Tanaka, 1973] ou au modèle PCW de Ponte Castaneda et Willis. En effet, un autre jalon a été atteint lorsque [Ponte Castaneda & Willis, 1995] ont introduit le concept de *sphères de sécurité* : les particules peuvent désormais avoir une morphologie quelconque et sont inscrites dans un ensemble fermé de géométrie arbitraire (la sphère, dont la forme facilite les calculs). L'intersection avec un autre ensemble est nulle mais le contact entre deux ensembles est autorisé. Néanmoins l'hypothèse géométrique utilisée reste arbitraire et peut conduire à un mauvais positionnement des propriétés effectives obtenues, notamment pour les microstructures à la distribution de phases complexe. [Benveniste et *al.*, 1991] par exemple critiquaient déjà le fait que la méthode de Mori-Tanaka ne donne pas toujours une symétrie diagonale pour leur estimation du tenseur de rigidité effectif lorsque les inclusions dispersées n'ont pas d'alignement ou de formes similaires.

Ainsi donc, si les approches en champs moyens peuvent donner une estimation pertinente du champ local à partir de descripteurs statistiques pour un temps de calcul très faible par rapport aux champs complets, y compris dans un cadre non-linéaire grâce au concept de LCC, ces approches impliquent une distribution de phase soit isotrope soit trop académique (distribution ellipsoïdale par exemple [Willis, 1977]) et sont rapidement limitées pour des composites présentant des distributions de phase complexes et très anisotropes. Or un polycristal - si chaque grain est assimilé à une phase indépendante - peut avoir une distribution anisotrope (c'est par exemple le cas des macrozones dans les Titanes [Le Biavant et *al.*, 2001]) et/ou complexe (notamment si on veut s'intéresser à l'état local des polycristaux après des processus de mise en forme comme le laminage [Prakash & Lebensohn, 2009]).

2.3 Une approche alternative en élasticité : le modèle de Bretin

Bretin [Bretin et al., 2019a ; Bretin et al., 2019b ; Bretin et al., 2020 ; Bretin, 2020] s’est intéressé à la donnée du champ local en vue de modéliser explicitement l’effet du voisinage et de reproduire par Automate Cellulaire (AC) les comportements extrêmes. Il s’est placé dans un cadre élastique linéaire [Bretin et al., 2019a ; Bretin et al., 2019b] et a proposé un modèle basé sur Automate Cellulaire.

Ce modèle semi-analytique utilise une structure de Kelvin (sous-section 2.3.2) effaçant volontairement l’influence de la morphologie pour se concentrer sur les effets de l’orientation cristallographique du grain et de son voisinage sur le champ local. Une base de données *off-line* a été constituée par EF (sous-section 2.2.1.1). Elle utilise cette structure de Kelvin et regroupe les différentes positions relatives possibles et les différentes OC parmi un ensemble prédéfini. Cette base de données permet de reconstruire l’influence des voisinages modélisés.

Dans la sous-section 2.3.1, les équations constitutives de l’effet de voisinage tel que décrit par Bretin sont expliquées et les hypothèses utilisées par le modèle de Bretin, détaillées. Dans la sous-section 2.3.2, une explication générale sur les Automates Cellulaires est donnée, avec notamment un focus sur la structure de Kelvin. Dans la sous-section 2.3.3, le principe de fonctionnement du modèle de Bretin est décrit précisément. Enfin, les avantages (sous-section 2.3.4) et limites (sous-section 2.3.5) du modèle de Bretin sont discutées.

2.3.1 L’effet de voisinage selon Bretin

Bretin considère un grain A dans un agrégat donné. Ce grain possède un voisinage $\{Bi\}$ composé de N autres grains Bi . L’ensemble est soumis à un chargement macroscopique E . [Bretin, 2020] définit alors l’effet du voisinage $\Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^A$ comme suit :

$$\Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^A = \varepsilon_{\{Bi\}}^A - \varepsilon_{eff}^A \quad (2.5)$$

Le terme $\varepsilon_{\{Bi\}}^A$ correspond à la déformation moyenne du grain A dans l’agrégat. Le terme ε_{eff}^A correspond à la déformation moyenne de ce même grain A plongé dans un milieu infini ayant les mêmes propriétés que le milieu effectif (C^{eff}).

En analysant les résultats obtenus par des simulations EF, Bretin a pu théoriser puis valider deux hypothèses importantes :

La première hypothèse de Bretin, qu’il vérifiera dans [Bretin et al., 2019a] est que le *différentiel de déformation* $\Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^A$, autrement dit l’effet du voisinage $\{Bi\}$ sur A , est indépendant de l’OC du grain A . Cette hypothèse rejoint d’ailleurs les observations faites par [Guilhem et al., 2010] (section 2.1). Cette hypothèse peut se traduire par l’équation suivante :

$$\Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^A \approx \Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^{Aeff} \quad (2.6)$$

En effet, dans le cas d’un agrégat de fer ou de titane avec une distribution isotrope d’OC et soumis à un chargement dans un cadre élastique linéaire, les variations de contraintes observées dans un grain donné pour différents voisinages sont similaires à celles observées dans ce grain en changeant son orientation cristallographique et en gardant exactement le même voisinage [Bretin, 2020].

La deuxième hypothèse de Bretin, qu'il vérifiera dans [Bretin et *al.*, 2019b] est que le *différentiel de déformation* $\Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^{Aeff}$ du grain A entouré de son voisinage $\{Bi\}$ est approximé par le cumul linéaire des effets individuels $\Delta\varepsilon_{Bi}^{Aeff}$ de chaque voisin Bi . Les éventuels effets non-linéaires sont négligés, ce qui rend cette hypothèse moins pertinente hors du cadre élastique linéaire [Bretin et *al.*, 2020]. Cette hypothèse peut se traduire par l'équation suivante :

$$\Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^{Aeff} \approx \sum_{i=1}^N \Delta\varepsilon_{Bi}^{Aeff} \quad (2.7)$$

En résumé, la variation de contrainte induite par le voisinage d'un grain est indépendante de l'orientation cristallographique dudit grain (première hypothèse) et la variation de contrainte induite par l'ensemble des voisins peut être considéré comme la somme des influences de chaque voisin considéré indépendamment (deuxième hypothèse).

2.3.2 Les Automates Cellulaires

2.3.2.1 Généralités

Définition : Un Automate Cellulaire est une grille, le plus souvent régulière, en deux ou trois dimensions, potentiellement plus, de cellules dont l'état dépend des propriétés intrinsèques de la cellule et de celui des cellules voisines. Une cellule possède donc un état, dépendant de la configuration de son voisinage, parmi un ensemble fini d'états possibles. Cet ensemble peut être potentiellement variable d'une cellule à l'autre. Une règle de transition strictement locale permet de codifier ces changements d'état et autorise ainsi la modélisation de comportements globaux pouvant être très complexes [von Neumann, 1951 ; von Neumann, 1966 ; Guillon, 2008].

L'idée de l'[Automate Cellulaire](#) vient de Stanislaw Ulam pour étudier la croissance des cristaux. Ce premier modèle sera réutilisé et adapté par John von Neumann [von Neumann, 1951]. Celui-ci va construire un modèle mathématique [von Neumann, 1966] dont le résultat sera le *Copieur et Constructeur Universel*, premier véritable Automate Cellulaire, où chaque cellule possède 29 états distincts [Poundstone, 1985] dont le but était de démontrer la possibilité de l'auto-réplication [Sarkar, 2000].

Un des exemples les plus connus d'Automate Cellulaire est le jeu de la vie développé par Conway en réponse à la problématique de Neumann à propos des machines à capacité d'auto-réplication. L'état (binaire sur la figure 2.2) de chaque cellule ne dépend que de leur voisinage (les 8 cellules alentours sur la figure 2.2) ce qui n'empêche pas l'apparition de comportements globaux très complexes. Trois grandes catégories de structures peuvent ainsi être définies : *les structures stables* (comme la structure de la figure 2.2a, qui est appelée un "bloc" de taille 2 et qui est la plus petite structure stable existante), *les structures oscillantes* (comme la structure de la figure 2.2b, qui est appelée une "balise" de période 2, c'est-à-dire qui revient à son état initial après une génération) et *les vaisseaux spatiaux* (comme la structure de la figure 2.2c, qui est aussi appelée un moteur de commutation de pose de blocs, c'est-à-dire qui revient à son état initial après une translation, ici sans détruire totalement la structure existant aux générations antérieures). Des structures plus complexes peuvent être ensuite bâties sur la base de ces trois catégories comme les "canons" réunissant une structure stable et expulsant à intervalle régulier des vaisseaux spatiaux etc. Le jeu de la vie est ainsi à l'origine de toute une arborescence de structures, chacune avec leurs propriétés propres.

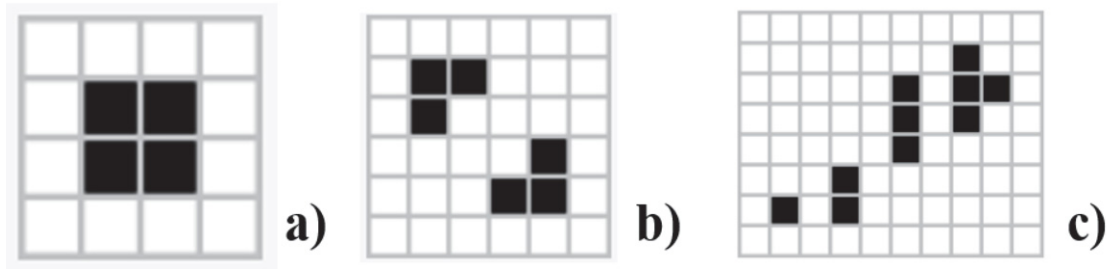


FIGURE 2.2 – Trois exemples du jeu de la vie, imaginé par Conway en 1970* avec respectivement une structure stable (a), oscillante (b) et un vaisseau spatial (c)

* source de l'image : [Conway, le jeu de la vie \(lien permettant de visualiser le caractère dynamique de ces structures\)](#)

Pour construire l'AC, il faut donc définir le voisinage, qualifié de topologie, et les propriétés de chaque cellule (fixes ou variables d'une cellule à l'autre). Il faut également définir une règle de transition locale qui permet pour une cellule ayant une propriété donnée ainsi qu'un état existant, de savoir quels états sont accessibles, et en fonction de la configuration du voisinage, quel état va être atteint à l'itération suivante.

A l'instant n , cette règle locale est appliquée à chacune des cellules en utilisant comme données l'état de chaque cellule à l'instant $n - 1$. On obtient alors un nouvel état n pour chaque cellule, le calcul s'appliquant à toutes les cellules en même temps. Pour un unique changement d'état, une seule itération est nécessaire. Si on s'intéresse à un processus dans la durée (fluage...) ou répétitif (cycles de chargement...), ou qu'on cherche à améliorer la précision des résultats, l'automate utilisera donc le dernier état de chaque cellule pour calculer l'état suivant de chacune d'entre elles et plusieurs itérations seront ainsi réalisées. Le niveau de discrétisation temporelle est donc entièrement décidé par l'utilisateur qui définit l'incrément de temps correspondant à l'intervalle entre les instants n et $n - 1$.

La topologie correspond à la définition morphologique du voisinage des cellules de l'AC. Elle permet à chaque cellule d'identifier l'ensemble de ses voisins, c'est-à-dire l'ensemble des cellules ayant une influence sur elle : les autres cellules sont considérées comme trop lointaines et leur influence est ignorée. Dans la majorité des études produites par la littérature scientifique, la topologie est fixe c'est-à-dire qu'elle est la même pour chaque cellule : les voisins sont aux mêmes positions relatives et - à l'exception parfois des cellules frontalières - il y en a le même nombre. On parle d'Automate Cellulaire Topologiquement Régulier. Toutefois, il est théoriquement possible de construire un Automate Cellulaire Topologiquement Irrégulier où chaque cellule a une topologie de voisinage qui lui est propre. Dans ce cas, en plus de la règle de transition locale, il est nécessaire de définir une règle d'identification locale du voisinage.

Les cellules composant L'Automate Cellulaire Topologiquement Régulier peuvent être - lorsqu'elles sont en deux dimensions - triangulaires avec 3 ou 12 voisins par cellule, carrées avec 4 (configuration de Von Neumann) [von Neumann, 1966] ou 8 voisins (configuration de Moore) [Menard & Marceau, 2006], ou encore hexagonales avec 6 voisins [Adamatzky et al., 2010]. Le nombre de configurations de voisinages possibles dans le cadre d'un Automate Cellulaire Topologiquement Régulier est, comme précédemment mentionné, limité car toutes les cellules ont la même forme et le même nombre de voisins.

En trois dimensions, toujours dans le cadre régulier, une structure cubique peut-être employée avec 6 ou 26 voisins, selon si les cellules situées dans le prolongement des grandes diagonales sont considérées comme des voisins de la cellule centrale ou non. Il reste également la possibilité de réaliser une structure *tétrakaidécaédrale*, c'est à dire à 14 faces (donc 14 voisins) avec des octaèdres tronqués : c'est la **structure de Kelvin**, utilisée par [Bretin, 2020]. La figure 2.3a illustre la forme de chaque cellule dans un tel cas tandis que la figure 2.3b donne une illustration de l'assemblage de telles cellules aboutissant à une structure de Kelvin.

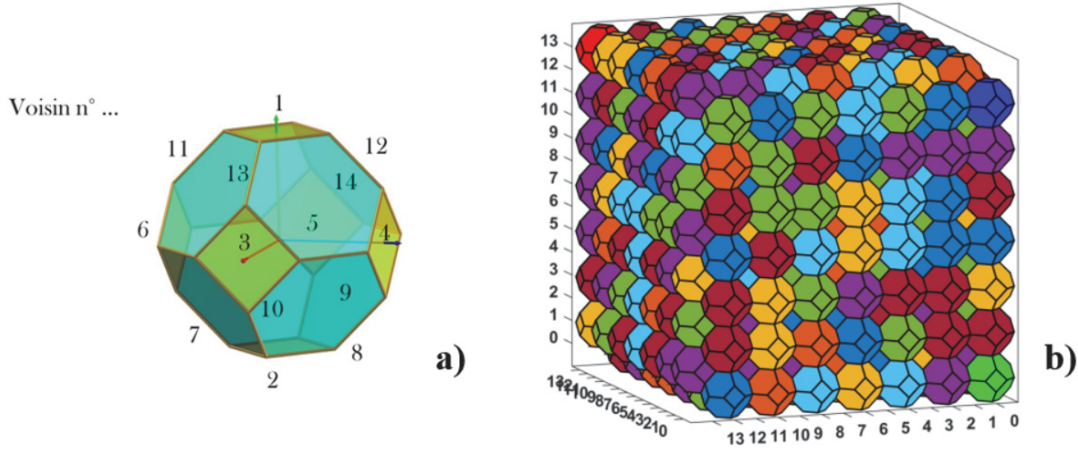


FIGURE 2.3 – Cellule tétrakaidécaédrale avec numérotation des voisins (a) ** - Structure de Kelvin à 686 grains [Bretin, 2020] (b)

** source de l'image : [Trétrakaidécaèdre](#)

L'Automate Cellulaire est utilisé dans de nombreux domaines différents, comme la biologie [Chen et *al.*, 2011], en sociologie [Alizadeh, 2011], en épidémiologie [Slimi et *al.*, 2008], en météorologie [Silva et *al.*, 2019] ou encore en métallurgie [Pineau, 2019]. Dans ce dernier domaine, différents Automates Cellulaires ont été développés. En 1996, [Montheillet & Gilormini, 1996] ont proposé un modèle d'Automate Cellulaire micromécanique pour étudier le comportement mécanique d'un polycristal biphasé. Ce modèle est le premier à prendre en compte pour sa modélisation, différents paramètres structuraux comme la taille de grain, l'écrouissage ou encore l'adoucissement qui permettent de faire évoluer les caractéristiques mécaniques de la cellule (chaque cellule représentant ici un grain). [Pourian, 2014] a développé au sein du LOPFA un Automate Cellulaire pour prédire le comportement micromécanique des alliages de Titane sous chargement uniaxial de Dwell-Fatigue. Le modèle de Pourian a servi de base pour le développement du modèle de [Bretin, 2020].

2.3.2.2 Les méthodes de réduction : quel positionnement pour l'Automate Cellulaire ?

Les méthodes de réduction (*Reduced Order Modeling* en anglais) ont pour but de résoudre des problèmes de dimensions élevées, souvent non-linéaires, sans avoir à affronter un coût de calcul exorbitant, ceci en utilisant une hypothèse de *variables séparées*. L'idée est d'approximer les champs solutions inconnus mais dépendant de plusieurs paramètres, dont entre autres le temps et l'espace, par une somme finie de termes dont chacun est un produit de fonctions d'une seule variable. Plus nombreux sont les termes, meilleure est l'approximation qui deviendra exacte pour une somme infinie, le nombre de termes dans la somme correspondant à l'ordre du modèle.

Il est possible de procéder en séparant espace et temps-paramètres. La solution approximée est alors intégrée sur l'ensemble de l'espace pour chaque incrément de temps, les paramètres étant (re)définis à chaque incrément de temps. On peut également procéder de manière inverse, c'est-à-dire en séparant espace-paramètre et temps : la solution approximée est alors intégrée sur l'ensemble du temps et une corrélation est effectuée pour chaque point de mesure de l'espace, où les paramètres ont à chaque fois reçu une valeur, qui peut varier. Il faut aussi faire la distinction entre les méthodes *a priori* qui ne nécessitent aucune simulation préalable, et les méthodes *a posteriori* qui utilisent des échantillons de la solution à approcher avant de la décomposer. La méthode peut, enfin, utiliser une stratégie *off-line*, c'est-à-dire utilisant un set de données prédéfini, ou *on-line*, c'est-à-dire en étant alimentée en temps réel (ou en décalé) par de nouvelles données.

L'approche POD (Proper Orthogonal Decomposition) : La *Décomposition Orthogonale aux valeurs Propres* est une méthode *a posteriori*, c'est-à-dire donnant des résultats depuis un ensemble de données entrées au préalable. Elle est basée sur une *séparation en espace/temps-paramètre*, c'est à dire que le calcul se fera pour un temps donné. Il est aussi possible de mener une phase d'apprentissage sur un intervalle de temps donné, avec une discrétisation peu raffinée. Cela permet alors de mener une analyse *a priori*. L'approximation POD qui s'ensuit doit cependant rester dans le domaine de validité des instantanés (*snapshots*) calculés durant la phase d'apprentissage. Si on utilise une stratégie *off-line*, le calcul des instantanés se fait préalablement à la résolution. Avec une stratégie *on-line*, la résolution utilise les instantanés calculés juste avant [Courtier, 2013].

La POD possède deux approches : la POD classique, introduite par [Lumley, 1967] et la POD-instantanée (*Snapshot POD*), introduite par [Sirovich, 1987], initialement pour des problèmes d'écoulements turbulents en mécanique des fluides, mais désormais cette méthode est aussi utilisée en mécanique des matériaux [Ganapathysubramanian & Zabararas, 2004 ; Monteiro et *al.*, 2008 ; Ganapathysubramanian & Zabararas, 2008]. [Ganapathysubramanian & Zabararas, 2004 ; Ganapathysubramanian & Zabararas, 2008] travaillent ainsi à l'échelle microscopique, sur la texture de matériaux polycristallins pour des applications de contrôle de celle-ci à l'échelle macroscopique quand [Monteiro et *al.*, 2008] font eux appel à une méthode multi-échelles pour résoudre un problème de conduction thermique et électrique fortement non-linéaire dans un matériau hétérogène. D'après [Holmes et *al.*, 1997] qui ont étudié l'optimalité de la POD d'un point de vue énergétique, même une approche d'ordre peu élevée permet d'approximer le champ solution avec précision [Courtier, 2013].

L'approche PGD (Proper Generalized Decomposition) : La *Décomposition Généralisée aux valeurs Propres* est une méthode *a priori* non-incrémentale, itérative, résolvant des pseudo-problèmes aux valeurs propres. Aucune connaissance de la solution n'est requise et il n'y a pas d'utilisation de propriétés d'orthogonalité [Courtier, 2013], par contre, elle exige la séparabilité de toutes les équations impliquées (pas seulement des champs de paramètres) ce qui n'est pas toujours possible, notamment pour les problèmes fortement non-linéaires. Enfin, elle peut être couplée à des méthodes Elements Finis (EF) [Ammar et *al.*, 2011]. La PGD considère une séparation en espace, en temps et en paramètres, ce qui fait que sa complexité croît linéairement avec la dimension du problème contrairement à une méthode "standard" où la complexité va croître de manière exponentielle. Elle est donc une approche particulièrement pertinente pour les problèmes de dimensions élevées, comme l'homogénéisation [Lamari et *al.*, 2010 ; Neron & Ladeveze, 2010 ; Chinesta et *al.*, 2013] et la mécanique des matériaux [Ghnatios et *al.*, 2010 ; Bognet et *al.*, 2010]. De plus, le caractère non-incrémental de la résolution permet de considérer des phénomènes aux temps caractéristiques différents [Beringhier et *al.*, 2010].

Si la PGD cherche également les "modes"³ solutions (produit d'une fonction d'espace, d'une fonction de temps et d'une fonction des paramètres), elle utilise la formulation variationnelle du problème et non le champ solution. De ce fait, la PGD n'obtient jamais les mêmes résultats ni les mêmes modes que la POD, avec ou sans phase d'apprentissage [Despret, 2015]. Il est à noter également que l'intégrale de temps doit être discrétisée *a priori*. Deux méthodes sont souvent utilisées : d'un côté, la *méthode du résidu*, qui consiste à minimiser une fonction coût dépendant des fonctions d'espace et de temps. Si la méthode est très adaptée à un cadre discret, le coût de calcul peut être élevé et le critère de sortie est arbitraire [Nouy, 2010 ; Billaud-Friess et *al.*, 2014]. De l'autre côté, la méthode du "*point fixe*" implique de résoudre un système de deux équations à deux inconnues en fixant une inconnue pour trouver l'autre. Si cette méthode n'a pas de critère de sortie arbitraire, elle nécessite que les champs d'espace et de temps soient séparables [Heyberger et *al.*, 2013].

Positionnement de l'Automate Cellulaire : Par comparaison avec les méthodes précédentes, on peut donc en déduire que l'Automate Cellulaire est une méthode de réduction à champs séparés en espace/temps-paramètre, fonctionnant *a priori* et *pouvant être* incrémentale afin d'améliorer la prédiction. Au sein de cet automate, une règle locale de comportement est introduite dans chaque cellule, tenant compte de son état, et de celui de ses voisins.

Un des grands intérêts de l'Automate Cellulaire par rapport aux Éléments Finis est qu'il n'est pas dépendant de fonctions d'interpolation ou de fonctions de minimisation (Newton-Raphson, Runge-Kutta ...) mais de formules analytiques, ce qui supprime tous les problèmes de convergence ou de discrétisation puisque la transition n'est pas sensible à une taille de maillage ni d'incrément. La pertinence de la solution est cependant directement liée à celle des formules implémentées. L'erreur induite par ces dernières ne peut pas être minimisée ou corrigée en raffinant le maillage spatial ou l'incrément de temps. Par contre il est possible de relancer le calcul afin de faire converger la solution vers un état stable dans les cellules. Enfin, la règle locale s'applique de la même façon à toutes les cellules, ce qui rend plus délicat quoique toujours possible la modélisation de comportement locaux différents ou de cellules différenciées.

2.3.3 Description détaillée du modèle de Bretin

2.3.3.1 Principe de fonctionnement

Structure de l'agrégat : Le modèle de Bretin est basé sur un Automate Cellulaire Régulier (sous-section 2.3.2.1) pour le calcul de l'effet de voisinage. Cet AC utilise une structure de Kelvin périodique (figure 2.4a et b ainsi que paragraphe suivant) dont la taille (le nombre de cellules par côté) est définie par l'utilisateur. *Chaque cellule est associée à un grain du polycristal.* Par défaut, le repère de l'agrégat est le même que celui dans lequel est défini le chargement, mais l'utilisateur peut le modifier.

Morphologiquement, la structure de Kelvin est périodique, c'est à dire qu'il est possible de la concaténer à elle-même sans interstice dans les trois directions. Du point de vue mécanique, il est possible de considérer les cellules frontalières comme des cellules "normales" avec moins de voisins (certains des premiers résultats de [Bretin, 2020] ont été obtenus avec ce choix), ou encore de leur attribuer des propriétés différentes. Il est aussi possible soit de considérer les cellules frontalières comme des cellules "normales" et de les connecter (dans le sens d'une attribution de voisins) aux cellules du bord opposé, comme l'illustre la figure 2.4b. C'est le choix qu'a fait Bretin pour son modèle.

3. En référence à la décomposition de Fourier d'un signal en modes élémentaires

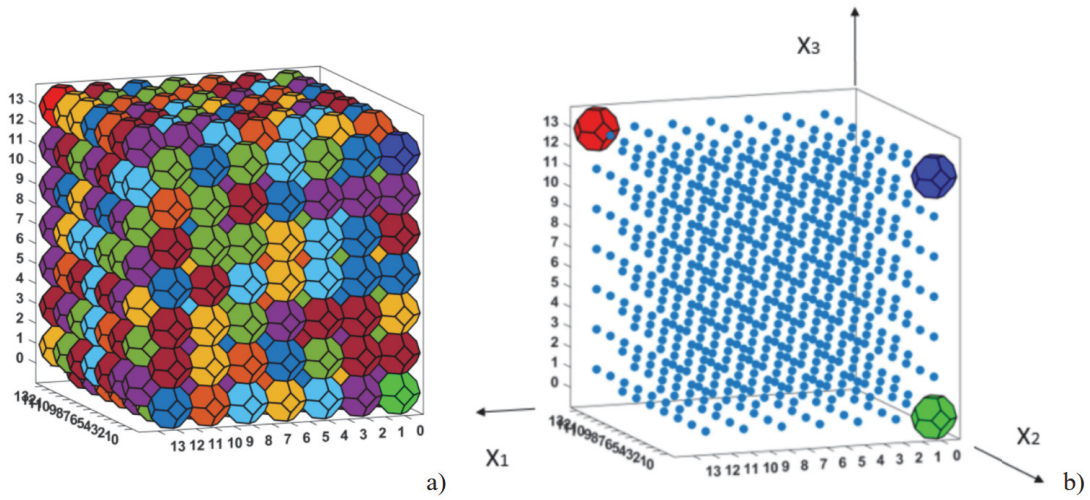


FIGURE 2.4 – Structure de Kelvin à 686 grains [Bretin, 2020] (a) - Du fait de la structure par nature répétitive de l'agrégat de Kelvin, si la cellule étudiée est la cellule *rouge*, alors les cellules *verte* et *bleue* sont des voisins directs avec des vecteurs intercentroïdes respectivement de $(1 -1 1)$ et $(1 -1 -1)$ (b) - figure extraite de [Bretin et *al.*, 2019b]

Définition du voisinage de la cellule : Les cellules / les grains ayant une forme tétrakaidécaédrale, et Bretin considérant la structure périodique, ils ont *tous* 14 voisins immédiats (figure 2.3a), et ont tous la même topologie. Bretin va cependant plus loin dans la définition du voisinage puisqu'il imagine plusieurs possibilités pour celui-ci. Il est ainsi possible de considérer :

- ★ les 14 voisins immédiats uniquement ([Bretin, 2020] parle de "première couche de voisins")
- ★ les deux premières couches de voisins (les voisins immédiats et les grains adjacents à ces derniers, c'est-à-dire les couches violettes et jaunes de la figure 2.5 ci-dessous, soit un total de 64 voisins)
- ★ les trois premières couches de voisins pour un total de 258 voisins par grain (les deux couches précédentes et les grains adjacents à ces derniers, soit les couches violettes, jaunes et bleues de la figure 2.5)

Ce nombre de voisins à considérer dans le modèle est uniformément appliqué à l'ensemble des grains.

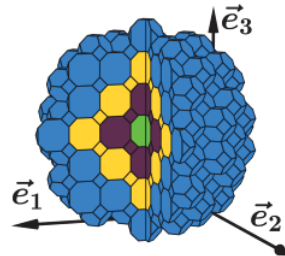


FIGURE 2.5 – Organisation des couches de voisins autour du grain étudié avec respectivement 14 grains (première couche, en violet) ; 50 grains (deuxième couche, en jaune) et 194 grains (troisième couche, en bleu) [Bretin, 2020]

Définition des propriétés intrinsèques et des états de chaque cellule : Pour une simulation (à matériau fixé), chaque cellule se voit attribuer le tenseur de rigidité de la maille cristalline exprimé dans le repère cristallin ainsi que le tenseur de rigidité effectif isotrope du milieu homogénéisé. Ces tenseurs sont représentés avec la notation de Mandel⁴ [Bannon, 2018]. Une orientation cristallographique tirée aléatoirement (sous-section 2.3.3.2 qui suit) est en outre attribuée à chaque cellule. Les tenseurs de chaque grain sont alors réécrits dans le repère global. Enfin, l'état d'une cellule correspond à son état de déformation moyenne. C'est cet état qui sera amené à évoluer par la loi de transition.

Loi de transition : L'état de chaque cellule évolue dépendamment de la déformation que subit la cellule seule, et de la déformation supplémentaire provoquée par chacun de ses voisins comme l'illustre l'équation 2.8.

$$\varepsilon_{\{Bi\}}^A = \varepsilon_{eff}^A + \sum_{i=1}^N \Delta \varepsilon_{Bi}^{Aeff} \quad (2.8)$$

Où ε_{eff}^A est la déformation du grain A isolé dans le milieu infini pourvu des propriétés du milieu effectif (*i.e.* sans effet de voisinage) obtenue *via* la théorie d'Eshelby. La forme d'octaèdre tronqué est approximée par une sphère. $\Delta \varepsilon_{Bi}^{Aeff}$ correspond à l'influence individuelle du voisin Bi , obtenus *via* la base de données. Cette équation peut être illustrée par la figure 2.6 ci-dessous.

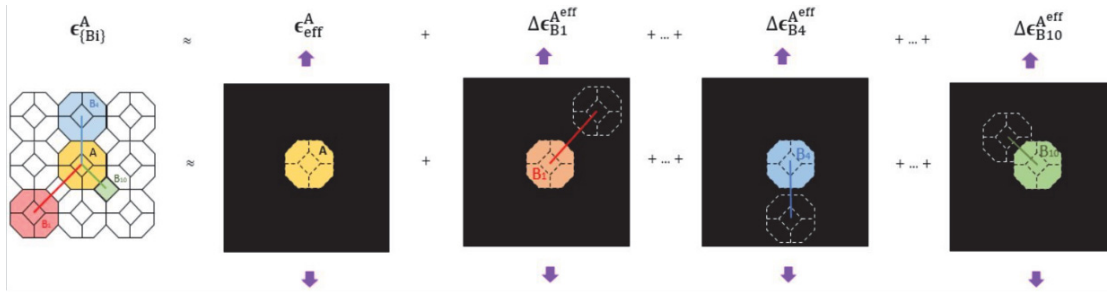


FIGURE 2.6 – Calcul de l'effet de voisinage d'un grain A au sein d'un agrégat de Kelvin selon le modèle de Bretin avec un focus sur 3 voisins parmi les 14 voisins directs

2.3.3.2 Constitution de la base de données

Tout d'abord 40 couples de quaternions sont aléatoirement générés, puis sont convertis en angles d'Euler (en convention de Bunge) pour constituer un ensemble d'orientations cristallographiques qui seront attribuées de manière aléatoire à chaque grain/cellule.

Les tenseurs de rigidité de la maille cristalline de différents matériaux ont été considérés pour cette base de données (Titane, Acier 316L⁵, Fer, Aluminium, Nickel). Des simulations en champs complet [Bretin et al., 2019a] ont permis d'obtenir pour chacun de ces matériaux un tenseur de rigidité effectif "idéal" pour l'agrégat (basé sur les travaux de [Haboussa, 2014; Cailletaud & Coudon, 2016]).

4. voir chapitre 3, sous-section 3.5.1

5. La maille élémentaire du 316L a été obtenue d'après les travaux de [Guilhem, 2011]

Ensuite, l'ensemble des positions relatives possibles pour les voisins sont repérées et chaque grain reçoit un numéro qui lui est propre. L'identification des voisins pour chaque grain - coûteuse en temps de calcul - est réalisée une unique fois pour chaque nombre de voisins (14, 64 puis 258 voisins, soit respectivement, 1, 2 puis 3 couches de voisins autour du grain étudié) et sauvegardé pour permettre une réutilisation rapide.

Enfin pour chaque position relative de voisin et pour chaque orientation cristallographique (celle du voisin, le grain d'intérêt ayant les propriétés du milieu effectif, voir équation 2.8), une simulation EF est réalisée (figure 2.6) et le différentiel de déformation $\Delta \varepsilon_{Bi}^{Aeff}$ généré par la présence du voisin Bi est enregistré, ceci pour chacun des matériaux (316L, Titane,...).

2.3.4 Un outil prometteur...

Le modèle de Bretin s'est révélé une alternative fiable aux simulations champs complets par EF (comme l'illustrent la figure 2.7 et [Bretin et al., 2019b]). Les temps de calculs de l'AC, deux ordres de grandeurs plus faibles que les simulations EF (une fois la base de données constituée) [Bretin, 2020] montrent eux, tout l'intérêt d'utiliser le modèle de Bretin pour générer rapidement un grand nombre de configurations et d'agrégats pour mener une étude statistique [Bretin et al., 2019b] - chose impossible à faire avec les EF.

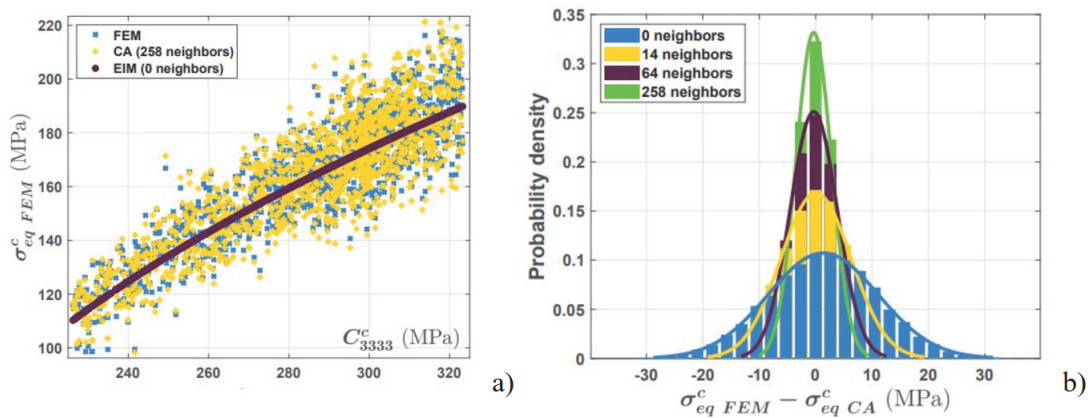


FIGURE 2.7 – Figures 4.6a et figure 4.6c (pp.102-103) de [Bretin, 2020] illustrant la proximité des résultats obtenus par EF et par le modèle de Bretin. A gauche, comparaison effectuée pour différents tirages de distributions aléatoires d'OC pour un agrégat de 686 grains sous déformation uniaxiale tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (a). A droite, histogramme combiné et gaussiennes associées des écarts EF / modèle de Bretin pour les grains avec différents voisinages à iso-OC, iso-agrégat et iso-chargement (b)

Si ces résultats sont l'apport le plus visible du modèle de Bretin, il a également été conçu dans l'optique de déterminer les probabilités d'apparition des configurations les plus néfastes, ce qui est à l'origine d'autres résultats qu'il convient de citer ici [Bretin, 2020] :

- ★ Une définition claire et explicite de l'effet du voisinage a été proposée. En effet, jusque là, l'effet du voisinage était vu comme une source d'erreur dont seul l'effet global était quantifié. La thèse de Bretin a permis d'apporter une définition permettant de distinguer l'effet de chaque voisin - ce qui n'est pas possible par EF - et de décrire plus précisément les configurations néfastes.
- ★ Même si un grain n'est pas "favorablement orienté" par rapport au chargement (*i.e.* son OC ne conduit pas à maximiser la contrainte en son sein), ce grain peut encore être soumis à une contrainte supérieure à la contrainte effective moyenne de l'agrégat en raison de l'effet de voisinage. Certaines configurations de voisinage spécifiques ont montré qu'elles conduisaient à une multiplication du niveau de contrainte par 2,3 pour le fer et par 1,5 pour le titane par rapport à la contrainte effective moyenne de l'agrégat.
- ★ Les grains présentant les valeurs de contrainte les plus élevées ont été prédits avec un écart moyen (respectivement maximal) de 1,5% (resp. 6,2%) pour le cristal de fer et de 0,6 % (resp. 2,3%) pour le cristal de titane par rapport aux références EF.
- ★ Par la génération de millions de données, la fonction de probabilité de la limite élastique du Fer a été tracée, mettant en évidence l'effet du volume (plus celui-ci augmente, plus la limite d'élasticité réelle diminue), et surtout l'importante dispersion des valeurs selon les distributions d'OC et la quantité de grains avec des orientations critiques.

2.3.5 ... avec des limites

Le modèle de Bretin, s'il a donné des résultats pertinents, souffre de quelques limitations. Certaines, qualifiées de conjoncturelles, ne demandent qu'un approfondissement du développement initié par Bretin tandis que d'autres sont davantage structurelles et liées à la nature même du modèle. Elles sont listées ci-dessous :

- ★ Première limite : la présence d'une base de données qui constitue un goulet d'étranglement en terme de temps de calcul - à l'instar des méthodes NTFA - et qui est incompatible avec l'attribution de propriétés morphologiques aux différents grains. C'est une limite conjoncturelle qui peut être levée.
- ★ Deuxième limite : l'absence d'effet morphologique. En effet, par la nature même de l'agrégat - constitué de grains identiques rangés de manière régulière - Bretin a volontairement supprimé l'influence de la morphologie et de la taille des grains au profit de l'influence des OC. De ce fait, rien n'interdit d'aller vers des microstructures plus réalistes à condition de pouvoir se passer de la base de données citée plus haut, celle-ci n'étant évidemment pas compatible avec des positions relatives arbitraires. C'est donc une limite conjoncturelle qui peut être levée.
- ★ Troisième limite : la modélisation du champ local reste limitée à un cadre strictement élastique linéaire isotrope. [Bretin et *al.*, 2020] ont en effet montré que le modèle devenait nettement moins fiable dès lors qu'on sortait de ce cadre. Cela est dû au principe d'additivité des effets des voisins, au coeur de la règle de transition de l'AC. C'est ici une limite structurelle du modèle de Bretin.

- ★ Quatrième limite : la nécessité de conserver un gradient modéré de propriétés mécanique impose que la modélisation soit "au coeur" de la matière... ce qui limite les possibilités de comparaisons avec les données expérimentales, généralement obtenues en surface. C'est une limite structurelle dans le sens où les hypothèses de Bretin deviennent de moins en moins pertinentes lorsque le contraste matériau augmente [Bretin, 2020], ce qui pose un problème en présence d'une surface libre, par essence de rigidité nulle.
- ★ Cinquième limite : l'agrégat modélise un matériau simpliste par rapport à la réalité où il est par exemple connu que les joints de grains jouent un rôle. L'agrégat est chimiquement homogène et ne comporte *ab initio* ni dislocations ni pré-contraintes résiduelles, zones thermiquement affectées, plastiquement déformées ou fissurées. C'est à nouveau une limite structurelle du modèle de Bretin qui ne dispose pas des outils mathématiques permettant de décrire le matériau avec ce niveau de détail.

2.4 Positionnement de la thèse et plan du manuscrit

Pour obtenir des informations sur le champ local, les méthodes en champs moyens ne sont pas satisfaisantes car elles minorent l'effet des voisins sur le champ intragranulaire. Les méthodes en champs complets sont très précises mais ont un coût de calcul très élevé qui ne les rendent pas compatibles avec de grandes séries d'essais statistiques. De plus, elles ne permettent pas d'accéder à l'influence individuelle de chaque voisin. Quant aux méthodes NTFA, elles sont tributaires d'une calibration fondée sur des calculs en champs complets. Bénéficiant du cadre de l'élasticité linéaire, le modèle de Bretin basé sur une approche Automate Cellulaire semble représenter un compromis acceptable entre coût de calcul et précision de l'estimation des effets de voisinage. Il permet aussi de distinguer l'influence de chaque voisin.

Toutefois pour utile qu'il soit, le modèle de Bretin n'est pas dénué de certaines faiblesses. En premier lieu, la modélisation des grains par des octaèdres tronqués - un parti pris pour se concentrer sur l'influence de l'orientation cristallographique des grains - est peu réaliste et par construction, nie toute influence de la taille relative des grains et de leur morphologie. En second lieu, le modèle obtient l'influence individuelle de chaque voisin - selon son OC et son positionnement relatif par rapport au grain d'intérêt - *via* l'utilisation d'une base de données, elle-même constituée par des simulations EF *off-line*. C'est un frein au développement du modèle vers d'autres agrégats et à son autonomie, à l'instar des méthodes NTFA.

De ce fait, la présente thèse vise à reprendre le développement du modèle de Bretin pour enlever une partie des limitations constatées à la sous-section 2.3.5. La première priorité est de rendre le modèle de Bretin totalement autonome vis-à-vis des Elements Finis par l'intégration d'un Module de Calcul analytique fondé sur la Méthode de l'Inclusion Equivalente (EIM) [Eshelby, 1957 ; Eshelby, 1959 ; Eshelby, 1961]. Cette approche permet de réaliser *on-line* et de manière peu coûteuse les calculs élémentaires nécessaires à l'estimation de l'influence individuelle de chaque voisin. Cela remplacera la nécessité d'une base de données et surtout sa mise en place par des simulations EF. La création, le principe de fonctionnement, la validation progressive à chaque nouvelle fonctionnalité introduite puis l'intégration de ce module analytique EIM dans le modèle de Bretin constitueront le chapitre 3.

Une fois le modèle de Bretin devenu autonome grâce à l'intégration du module analytique et l'ensemble évalué par comparaison à des simulations en champs complets, la priorité deviendra alors d'adapter ce modèle Bretin-EIM à une microstructure moins régulière où les effets morphologiques pourront davantage s'exprimer. Le passage d'une structure régulière à une microstructure totalement irrégulière nécessitera d'importantes adaptations du modèle ainsi qu'une nouvelle campagne de validation aux EF, ce qui sera l'objet du chapitre 4.

Le module EIM dont le codage aura été validé dans le chapitre 3 permettra ensuite une analyse de l'influence de l'orientation spatiale sur l'état des contraintes à l'intérieur et autour d'une inclusion anisotrope isolée dans un milieu infini isotrope. Puis le modèle de Bretin-EIM adapté au chapitre 4 pour traiter des microstructures polycristalline sera appliqué sur de grandes séries de tests statistiques afin d'apporter un éclairage sur plusieurs questions matériaux, comme l'importance de l'anisotropie élastique du matériau (l'acier 316L ayant une maille cristalline avec une plus forte anisotropie élastique que celle du titane), ou l'influence des relations cristallographiques de Burgers dans le Titane pour en tirer une synthèse. Enfin et à titre d'illustration du potentiel de ce nouveau modèle, la modélisation d'une seconde phase minoritaire (en l'occurrence des carbures dans une microstructure de 316L) sera abordée. L'ensemble de ces résultats seront regroupés dans le chapitre 5.

Le chapitre 6 fera une synthèse des principaux résultats obtenus ainsi que des limites - nouvelles ou persistantes - du nouveau modèle avant de conclure sur les nombreuses perspectives de développement possibles. L'ensemble des annexes est rassemblée ensuite à la fin de cette thèse (accessibles en 7) avec détails de calculs et notes algorithmiques avant de laisser la place aux références bibliographiques (accessibles en 8).

Chapitre

3

Construction d'un module de calcul analytique utilisant la théorie d'Eshelby pour remplacer la base de données constituée par EF

Contents

3.1	Méthode de l'Inclusion Equivalente d'Eshelby (EIM)	38
3.1.1	Théorie générale	38
3.1.2	Expressions détaillées dans le cas sphérique	41
3.1.3	Expressions détaillées dans le cas <i>Prolate</i>	42
3.1.4	Expressions détaillées dans le cas <i>Oblate</i>	43
3.1.5	Premières évaluations	44
3.2	Chargement et Orientation spatiale	47
3.2.1	Chargements étudiés	47
3.2.2	Définition de l'orientation spatiale	47
3.3	Description du modèle EF pour les évaluations	49
3.3.1	Application du chargement	49
3.3.2	Modélisation du milieu infini	49
3.3.3	Définition du maillage	50
3.4	Evaluation du module EIM pour des inclusions isotropes	52
3.4.1	Cas d'une cavité non-orientée	52
3.4.2	Inclusion spatialement orientée	53
3.5	Evaluation du module EIM pour des inclusions anisotropes	55
3.5.1	Prise en compte de l'orientation cristallographique	55
3.5.2	Procédure d'appel du module EIM dans le cas général	57
3.5.3	Confrontation EIM <i>vs</i> EF	58
3.6	Intégration du module EIM dans le modèle de Bretin	60
3.6.1	Rappels sur le modèle de Bretin	60
3.6.2	Remplacement de la base de données par le module EIM	61
3.6.3	Validation	62
3.7	Bilan du chapitre III	66

Le présent chapitre a pour but de détailler les étapes de construction, de validation et d'intégration au sein d'un modèle tourné vers le calcul du champ local dans un agrégat isotrope donné, d'un programme EIM (Equivalent Inclusion Method) unifié capable de traiter une inhomogénéité sphéroïdale, isotrope ou anisotrope, isolée dans un milieu infini élastique linéaire isotrope et spatialement orientée par rapport au chargement appliqué à l'infini. Ce module a été développé dans le but de remplacer la base de données constituée par des simulations Elements Finis dont se servait le modèle de Bretin pour estimer l'effet de voisinage (chapitre 2, sous-section 2.3.4).

Après des rappels théoriques sur la méthode EIM et son application à des inhomogénéités de forme sphérique, *Prolate* ou *Oblate*, le cas d'une inhomogénéité isotrope non orientée sera tout d'abord traité et les résultats obtenus confrontés aux résultats disponibles dans la littérature et à des simulations Elements Finis (sections 3.1 et 3.4). L'orientation spatiale du sphéroïde par rapport au système d'axes global attaché au milieu infini est ensuite introduite (section 3.2 et sous-sections 3.4.2 dans le cas isotrope et 3.5.3 dans le cas anisotrope). Un point sur la manière dont les références Elements Finis sont construites sera alors fait (section 3.4). Le cas d'une inhomogénéité anisotrope sera également abordé, avec les modifications que ce cas implique et une phase de validation où l'anisotropie est combinée avec de l'orientation spatiale (section 3.5). Enfin sera présenté - après un bref rappel sur le fonctionnement du modèle de Bretin et des limites imposées par la base de données - la manière dont le module EIM a été intégré et le nouveau fonctionnement du modèle, désormais qualifié de Bretin-EIM ainsi que sa validation aux EF (section 3.6) avant de conclure (section 3.7).

3.1 Méthode de l'Inclusion Equivalente d'Eshelby (EIM)

Le module EIM fut construit par étapes de complexité croissantes. Il n'a d'ailleurs pas été développé *ex-nihilo* : le module analytique a pour base un module de calcul développé par [Vincent et al., 2014] en fortran90 pour le calcul des champs de contraintes à l'intérieur et à l'extérieur d'une inhomogénéité isotrope de forme *Prolate* avec possibilité d'orientation spatiale. La thèse a permis d'étendre ce module aux sphéroïdes *Oblates*, aux sphéroïdes de nature anisotrope, et d'y intégrer l'orientation spatiale en sus. Chaque nouvelle fonctionnalité a été comparée à des solutions de référence EF tant à l'intérieur qu'à l'extérieur de l'inclusion.

Dans un premier temps, la base théorique générale de l'EIM [Eshelby, 1957 ; Eshelby, 1959 ; Eshelby, 1961] est résumée (sous-section 3.1.1). Les développements analytiques et expressions particularisées obtenus pour la forme Sphérique (sous-section 3.1.2, résultats repris de [Mura, 1987]), *Prolate* (sous-section 3.1.3, résultats repris de [Vincent et al., 2014]) et *Oblate* (sous-section 3.1.4, suivant le même degré de développement que [Vincent et al., 2014]) sont ensuite présentés et codés. La sous-section 3.1.5 présente alors une première évaluation des résultats obtenus par le module EIM vis-à-vis des résultats disponibles dans la littérature ([Mura, 1987] pour la forme *Prolate* ; [Shibata & Ono, 1978] pour la forme *Oblate*)

3.1.1 Théorie générale

Soit I une inhomogénéité ellipsoïdale, avec un tenseur de rigidité \mathbb{C}_I , noyée dans un milieu infini Ω de tenseur de rigidité $\mathbb{C}_0 \neq \mathbb{C}_I$. L'ensemble est soumis à un tenseur de déformation uniforme ε^0 à l'infini (avec pour tenseur de contrainte correspondant σ^0). Le but est d'étudier la perturbation générée par la présence de l'inhomogénéité. Ce problème correspond au problème inhomogène d'Eshelby avec chargement à l'infini dont les équations

constitutives sont :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathbb{C}_I : \varepsilon \quad \text{dans } I \\ \sigma &= \mathbb{C}_0 : \varepsilon \quad \text{dans } \Omega \setminus I \\ u &= \varepsilon^0 \cdot x \quad \text{pour } \|x\| \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.1)$$

La méthode de l'inclusion équivalente (EIM) consiste à introduire une déformation libre fictive ε^* donnée par (3.3) pour simuler l'inhomogénéité de telle sorte que le problème inhomogène d'Eshelby (3.1) devienne équivalent au problème homogène classique d'Eshelby [Eshelby, 1957] avec ε^0 à l'infini :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\sigma) &= 0 \\ \sigma &= \mathbb{C}_0 : (\varepsilon - \varepsilon^*) \quad \text{dans } I \\ \sigma &= \mathbb{C}_0 : \varepsilon \quad \text{dans } \Omega \setminus I \\ u &= \varepsilon^0 \cdot x \quad \text{pour } \|x\| \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.2)$$

Avec :

$$- \mathbb{C}_0 : \varepsilon^* = (\mathbb{C}_I - \mathbb{C}_0) : \varepsilon \quad \text{dans } I \quad (3.3)$$

Ainsi, la solution de (3.1) peut être dérivée de la solution du problème homogène (3.2) d'Eshelby. En effet, selon [Eshelby, 1957], si un sous-domaine fini de forme ellipsoïdale (inclusion) d'un milieu homogène subit une transformation induisant une déformation libre ε^* uniforme, alors la déformation finale de l'inclusion est aussi uniforme et liée linéairement à ε^* par l'intermédiaire du tenseur d'Eshelby $\mathbb{S}_{\mathbb{E}}$:

$$\varepsilon_I = \mathbb{S}_{\mathbb{E}} : \varepsilon^* + \varepsilon^0 \quad (3.4)$$

Les composantes de $\mathbb{S}_{\mathbb{E}}$ sont sans dimension et ne dépendent que du tenseur de rigidité du milieu infini et de la géométrie de l'inclusion (et donc pas de sa taille). Par conséquent, ε^* , défini par (3.3) pour établir l'équivalence formelle entre les problèmes (3.1) et (3.2), est également uniforme. Comme un problème d'élasticité a une solution unique, la solution d'Eshelby du problème homogène (3.2), avec ε^* défini par (3.3), est également la solution du problème hétérogène (3.1). Cela est vrai pour les points à l'intérieur et à l'extérieur de l'inclusion. En insérant (3.4) dans (3.3), on obtient ε^* en fonction de la déformation imposée à l'infini ε^0 comme ci-dessous :

$$\varepsilon^* = -[(\mathbb{C}_I - \mathbb{C}_0) : \mathbb{S}_{\mathbb{E}} + \mathbb{C}_0]^{-1} : (\mathbb{C}_I - \mathbb{C}_0) : \varepsilon^0 \quad (3.5)$$

De manière équivalente, insérer (3.3) dans (3.4) donne l'expression de ε_I en fonction de ε^0 :

$$\varepsilon_I = [\mathbb{I} + \mathbb{P} : (\mathbb{C}_I - \mathbb{C}_0)]^{-1} : \varepsilon^0 \quad (3.6)$$

Où \mathbb{I} est le tenseur identité d'ordre 4 classique, et $\mathbb{P} = \mathbb{S}_{\mathbb{E}} : (\mathbb{C}_0)^{-1}$ est le tenseur de Hill [Hill, 1965].

Lorsque le milieu infini est isotrope, le tenseur d'Eshelby peut être calculé analytiquement, en utilisant par exemple les fonctions de Green. De plus, le champ local de déformation dans le milieu infini est une fonction linéaire de ε^* quelle que soit la forme de l'inclusion ellipsoïdale. Les expressions de $\mathbb{S}_{\mathbb{E}}$ et du champ de déformation dans le milieu infini sont rappelées ci-dessous dans le cas général, à savoir pour toute inclusion ellipsoïdale, centrée à l'origine du système de coordonnées cartésiennes représenté sur la figure 3.1, dont les demi-axes sont de longueurs respectives a_1 , a_2 , et a_3 . Ces expressions seront particularisées pour les formes Sphérique, *Prolate* et *Oblate* dans les sous-sections suivantes. Les composantes du tenseur d'Eshelby sont notamment données par [Eshelby, 1957 ; Mura, 1987] :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \mathbb{S}_{\mathbb{E}ijkl} & = & \mathbb{S}_{\mathbb{E}jikl} = \mathbb{S}_{\mathbb{E}ijlk} \\ \mathbb{S}_{\mathbb{E}1111} & = & \frac{3a_1^2 A_{11} + (1-2\nu_0)A_1}{8\pi(1-\nu_0)} \\ \mathbb{S}_{\mathbb{E}1122} & = & \frac{a_2^2 A_{12} - (1-2\nu_0)A_1}{8\pi(1-\nu_0)} \\ \mathbb{S}_{\mathbb{E}1133} & = & \frac{a_3^2 A_{13} - (1-2\nu_0)A_1}{8\pi(1-\nu_0)} \\ \mathbb{S}_{\mathbb{E}1212} & = & \frac{(a_1^2 + a_2^2)A_{12} + (1-2\nu_0)(A_1 + A_2)}{16\pi(1-\nu_0)} \end{array} \right. \quad (3.7)$$

Toutes les composantes qui ne peuvent être obtenues par permutation circulaire de (1,2,3) sont nulles (par exemple $\mathbb{S}_{\mathbb{E}1232}=0$). ν_0 est le coefficient de Poisson du milieu infini. A_i , A_{ij} sont des intégrales elliptiques détaillées plus loin. Contrairement au tenseur de Hill, le tenseur d'Eshelby ne vérifie pas la symétrie majeure.

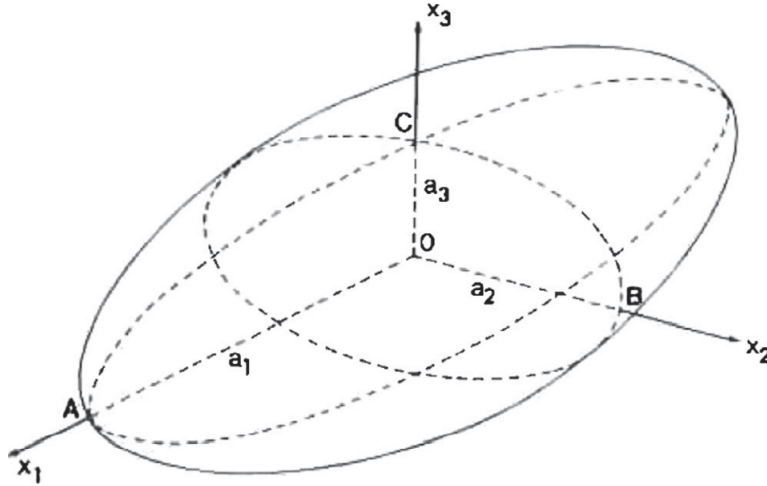


FIGURE 3.1 – Inclusion ellipsoïdale et système d'axes local [Mura, 1987]

Le champ des déformations dans le milieu infini est donné par [Mura, 1987] :

$$\varepsilon(x) = \mathbb{D}(x) : \varepsilon^* + \varepsilon^0 \quad (3.8)$$

Où :

$$\begin{aligned}
8\pi(1 - \nu_0)\mathbb{D}_{ijkl} = & \delta_{ij} \delta_{kl} (2 \nu_0 B_I - B_K + a_I^2 B_{KI}) \\
& + (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il}) [a_I^2 B_{IJ} - B_J + (1 - \nu_0)(B_K + B_L)] \\
& + 2 \nu_0 \delta_{kl} x_i B_{I,j} \\
& + (1 - \nu_0) [\delta_{il} x_k B_{K,j} + \delta_{jl} x_k B_{K,i} + \delta_{ik} x_l B_{L,j} + \delta_{jk} x_l B_{L,i}] \\
& - \delta_{ij} x_k (B_{K,l} - a_I^2 B_{KI,l}) \\
& - (\delta_{ik} x_j + \delta_{jk} x_i)(B_{J,l} - a_I^2 B_{IJ,l}) - (\delta_{il} x_j + \delta_{jl} x_i)(B_{J,k} - a_I^2 B_{IJ,k}) \\
& - x_i x_j (B_{J,lk} - a_I^2 B_{IJ,lk})
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Dans (3.9), δ_{ij} est le symbole de Kronecker, B_I, B_{IJ} sont des intégrales elliptiques dépendant du point d'intérêt et $f_{,i} = \partial f / \partial x_i$.

La convention suivante est appliquée : les indices minuscules répétés sont additionnés de 1 à 3, tandis que les indices majuscules prennent les mêmes numéros que les indices minuscules correspondants mais ne sont pas additionnés. Les équations (3.8) et (3.9) s'appliquent aux points situés à l'extérieur et à l'intérieur de l'inclusion. En effet, pour les points intérieurs, les intégrales elliptiques de (3.9) coïncident avec celles de (3.7) et leurs dérivées disparaissent [Mura, 1987]. Il en résulte que $\mathbb{D}(x) = \mathbb{S}_{\mathbb{E}}$ et l'équation (3.9) devient équivalente à l'équation (3.4), lorsque x est un point interne à l'inclusion.

Dans les sous-sections suivantes, les expressions (3.7) et (3.9) vont être particularisées dans le cas sphérique, *Prolate* puis *Oblate*. Il faut noter que dans le cas *Prolate*, les expressions sont directement reprises de l'article de [Vincent et al., 2014] et sont reportées dans ce manuscrit par souci d'exhaustivité.

3.1.2 Expressions détaillées dans le cas sphérique

La forme sphérique est caractérisée par la relation suivante :

$$a_1 = a_2 = a_3 = a \tag{3.10}$$

Dans ce cas, les intégrales elliptiques A_i, A_{ij} , utilisées pour le calcul des composantes non nulles du tenseur d'Eshelby deviennent des fonctions élémentaires [Mura, 1987]. Ces expressions, données ici pour la forme sphérique sont définies comme suit :

$$\begin{cases} A_i &= \frac{4\pi}{3} \\ A_{ij} &= \frac{4\pi}{5a^2} \end{cases} \tag{3.11}$$

Avec $\{i, j\} \in \{1, 2, 3\}$.

Les intégrales elliptiques $B_I(\lambda), B_{IJ}(\lambda)$ utilisées pour le calcul du tenseur $\mathbb{D}(x)$ deviennent :

$$\begin{cases} B_I(\lambda) &= \frac{4\pi a^3}{3(a^2 + \lambda)^{3/2}} \\ B_{IJ}(\lambda) &= \frac{4\pi a^3}{5(a^2 + \lambda)^{5/2}} \end{cases} \tag{3.12}$$

Avec $\{I, J\} \in \{1, 2, 3\}$ et λ étant une fonction dépendant uniquement du point d'intérêt x . Pour un point extérieur à l'ellipsoïde, la fonction scalaire λ est la plus haute racine positive de l'équation suivante :

$$\frac{x_1^2}{(a_1^2 + \lambda)} + \frac{x_2^2}{(a_2^2 + \lambda)} + \frac{x_3^2}{(a_3^2 + \lambda)} = 1 \tag{3.13}$$

Pour un point interne à l'ellipsoïde ou appartenant à sa surface, $\lambda = 0$ [Mura, 1987].

Les expressions analytiques des dérivées partielles de λ , $B_I(\lambda)$ et $B_{IJ}(\lambda)$ pour le cas sphérique sont disponibles en Annexe A.

3.1.3 Expressions détaillées dans le cas *Prolate*

La forme *Prolate* est caractérisée par la relation suivante :

$$a_1 > a_2 = a_3 \quad (3.14)$$

Dans ce cas, les intégrales elliptiques A_i, A_{ij} , utilisées pour le calcul des composantes non nulles du tenseur d'Eshelby [Mura, 1987] deviennent :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_2 = A_3 = \frac{2\pi a_1 a_2^2}{(a_1^2 - a_2^2)^{3/2}} \left[\frac{a_1}{a_2} \left(\frac{a_1^2}{a_2^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}} - \operatorname{argch}\left(\frac{a_1}{a_2}\right) \right] \\ A_1 = 4\pi - 2A_2 \\ A_{12} = A_{13} = A_{21} = A_{31} = \frac{A_2 - A_1}{(a_1^2 - a_2^2)} \\ A_{11} = \frac{2}{3} \left(\frac{2\pi}{a_1^2} - A_{12} \right) \\ A_{22} = A_{23} = A_{32} = A_{33} = \frac{\pi}{a_2^2} - \frac{A_{12}}{4} \end{array} \right. \quad (3.15)$$

Les intégrales elliptiques $B_I(\lambda), B_{IJ}(\lambda)$ utilisées pour le calcul du tenseur $\mathbb{D}(x)$ sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} B_1(\lambda) = \frac{4\pi a_1 a_2^2}{(a_1^2 - a_2^2)^{3/2}} (\operatorname{argch}(b) - \frac{c}{b}) \\ B_2(\lambda) = B_3(\lambda) = \frac{2\pi a_1 a_2^2}{(a_1^2 - a_2^2)^{3/2}} (bc - \operatorname{argch}(b)) \\ \text{avec : } b = \sqrt{\frac{a_1^2 + \lambda}{a_2^2 + \lambda}}, \text{ et } c = \sqrt{\frac{a_1^2 - a_2^2}{a_2^2 + \lambda}} \\ B_{12}(\lambda) = B_{13}(\lambda) = B_{21}(\lambda) = B_{31}(\lambda) = \frac{B_2(\lambda) - B_1(\lambda)}{(a_1^2 - a_2^2)} \\ B_{11}(\lambda) = \frac{2}{3} (\alpha - B_{12}(\lambda)), \text{ avec } \alpha = \frac{2\pi a_1 a_2^2}{(a_1^2 + \lambda)^{3/2} (a_2^2 + \lambda)} \\ B_{22}(\lambda) = B_{23}(\lambda) = B_{32}(\lambda) = B_{33}(\lambda) = \beta - \frac{1}{4} B_{12}(\lambda), \text{ avec } \beta = \frac{\pi a_1 a_2^2}{(a_1^2 + \lambda)^{1/2} (a_2^2 + \lambda)^2} \end{array} \right. \quad (3.16)$$

λ est défini de la même manière que pour la forme sphérique (équation 3.13), pour les points externes et internes à l'inclusion. Les expressions analytiques des dérivées partielles de λ , $B_I(\lambda)$ et $B_{IJ}(\lambda)$ pour le cas *Prolate* sont également disponibles en Annexe A.

3.1.4 Expressions détaillées dans le cas *Oblate*

La forme *Oblate* est caractérisée par la relation suivante :

$$a_1 = a_2 > a_3 \quad (3.17)$$

Les équations intégrales A_i, A_{ij} , ici exprimées pour la forme *Oblate* sont données par [Mura, 1987] :

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 = A_2 = \frac{2\pi a_1^2 a_3}{(a_1^2 - a_3^2)^{\frac{3}{2}}} [\arccos(\frac{a_3}{a_1}) - \frac{a_3}{a_1} \sqrt{1 - (\frac{a_3}{a_1})^2}] \\ A_3 = 4\pi - 2A_1 \\ A_{13} = A_{23} = A_{31} = A_{32} = \frac{A_1 - A_3}{(a_1^2 - a_3^2)} \\ A_{11} = A_{12} = A_{21} = A_{22} = \frac{\pi}{a_1^2} - \frac{1}{4} A_{13} \\ A_{33} = \frac{2}{3} (\frac{2\pi}{a_3^2} - A_{13}) \end{array} \right. \quad (3.18)$$

Les intégrales elliptiques $B_I(\lambda), B_{IJ}(\lambda)$, simplifiées dans le cas de la forme *Oblate* sont de la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} B_1(\lambda) = B_2(\lambda) = 2\pi a_1^2 a_3 \frac{(\arccos(b) - cb)}{(a_1^2 - a_3^2)^{3/2}} \\ B_3(\lambda) = 4\pi a_1^2 a_3 \frac{(\frac{c}{b} - \arccos(b))}{(a_1^2 - a_3^2)^{3/2}} \\ \text{avec : } b = \sqrt{\frac{a_3^2 + \lambda}{a_1^2 + \lambda}}, \text{ et } c = \sqrt{\frac{a_1^2 - a_3^2}{a_1^2 + \lambda}} \\ B_{13}(\lambda) = B_{23}(\lambda) = B_{31}(\lambda) = B_{32}(\lambda) = \frac{B_3(\lambda) - B_1(\lambda)}{a_1^2 - a_3^2} \\ B_{11}(\lambda) = B_{12}(\lambda) = B_{21}(\lambda) = B_{22}(\lambda) = \beta - \frac{B_{23}(\lambda)}{4}, \text{ avec } \beta = \frac{\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{a_3^2 + \lambda} (a_1^2 + \lambda)^2} \\ B_{33}(\lambda) = \alpha - \frac{2}{3} B_{31}(\lambda), \text{ avec } \alpha = \frac{\frac{4}{3} \pi a_1^2 a_3}{(a_3^2 + \lambda)^{\frac{3}{2}} (a_1^2 + \lambda)} \end{array} \right. \quad (3.19)$$

λ est défini de la même manière que dans l'équation 3.13, pour les points externes et internes à l'inclusion. Les expressions analytiques des dérivées partielles de λ , $B_I(\lambda)$ et $B_{IJ}(\lambda)$ dans le cas *Oblate* sont de même, disponibles en Annexe A. Toutes les expressions quelque soit la forme de l'inclusion ont été codées en Matlab 2019a.

Dans la suite du manuscrit, le rapport de forme est défini par $k = \frac{a_1}{a_3}$ avec a_3 imposé à 1mm pour simplifier le propos. Que le sphéroïde soit *Oblate* ou *Prolate*, cette définition assure que plus le rapport de forme est élevé plus la géométrie est critique par rapport au cas sphérique pour lequel $a_1 = a_2 = a_3 = a$ et $k = 1$.

3.1.5 Premières évaluations

Dans le cadre de la présente thèse, les expressions dédiées à l'inclusion *Prolate* ont été codées en Matlab sur le modèle du code fortran90 de [Vincent et *al.*, 2014]. Une première étape de l'évaluation a donc été naturellement de vérifier que les deux codes donnaient des résultats identiques.

3.1.5.1 Cas *Prolate*

Comme l'ont fait [Vincent et *al.*, 2014], la figure 3.2 présente la comparaison entre les résultats obtenus ici (marqueurs carrés) avec ceux publiés par [Mura, 1987] (lignes noires, importées à partir de la figure 5 de [Vincent et *al.*, 2014]). Ils concernent une inhomogénéité isotrope *Prolate* noyée dans un milieu infini élastique linéaire, soumis à l'infini à une traction uniaxiale tel que $\sigma_{33}^0 = 1\text{Pa}$.

Avec son axe de révolution dans la direction x_1 , l'inhomogénéité *Prolate* est orientée de manière transverse à la direction de chargement X_3 (sous-section 3.2.1). La composante σ_{33} du tenseur des contraintes est comparée au point A (voire figure 3.1) pour différents rapports de forme et différents contrastes de rigidité ($H = \frac{\mu_I}{\mu_0} - 1$, μ_I et μ_0 désignant respectivement le module de cisaillement de l'inclusion et du milieu infini) entre l'inclusion et le milieu infini. Les coefficients de Poisson de l'inclusion et de la matrice sont tous deux égaux à 0.3. Le cas $H = -1$ correspond donc à une cavité et plus H augmente, plus la rigidité de l'inclusion augmente sachant qu'elle est supérieure à celle du milieu infini dès que $H > 0$.

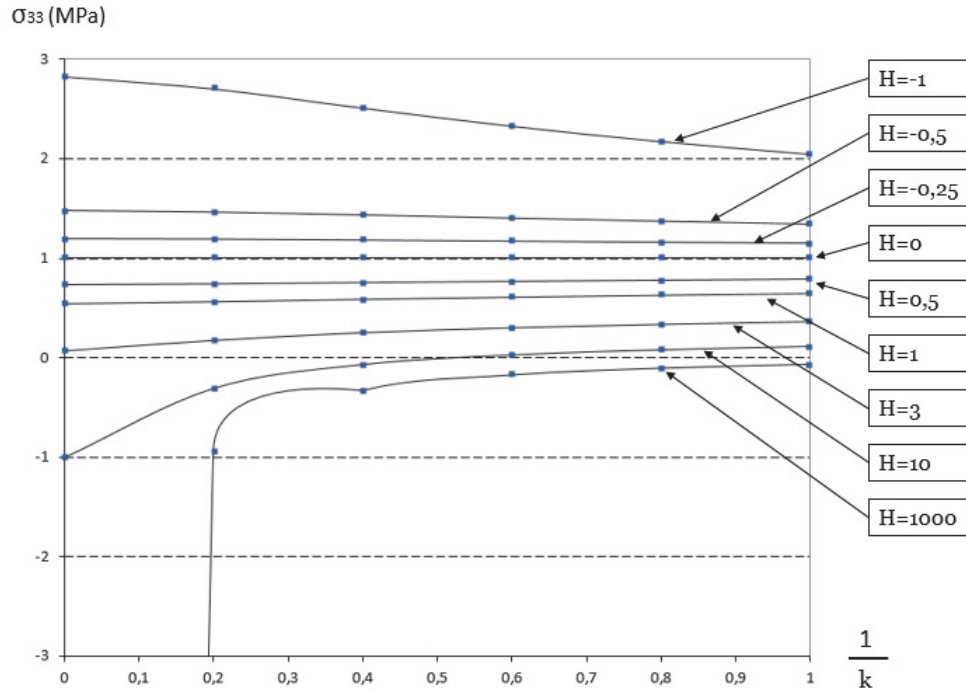


FIGURE 3.2 – *Prolate* - Composante σ_{33} du tenseur des contraintes dans la matrice au point A (figure 3.1), fonction de $\frac{1}{k}$ pour différents contrastes de rigidité (H) - Comparaison entre les résultats du code EIM de la thèse (marqueurs carrés) et les résultats de Mura (lignes, importées à partir de la figure 5 de [Vincent et *al.*, 2014])

La corrélation entre les deux jeux de courbes est excellente, l'erreur étant négligeable (erreur relative maximale de 0.2%).

3.1.5.2 Cas *Oblate*

Après avoir évalué les résultats produits par le code dans le cas d'un sphéroïde *Prolate*, la figure 3.3 compare les résultats obtenus par le Module EIM à ceux publiés par [Shibata & Ono, 1978] pour un milieu infini élastique linéaire isotrope contenant une inhomogénéité sphéroïdale *Oblate*, également isotrope. Il convient de noter que tous les résultats sont présentés ici dans le repère défini par Mura (figure 3.1). Le chargement à l'infini est uniaxial le long de l'axe x_2 de sorte que $\sigma_{22}^0 = 1$ Pa. Avec son axe de révolution correspondant à x_3 , l'inclusion sphéroïdale *Oblate* est donc transverse à l'axe de chargement.

Les valeurs de la contrainte normalisée $\frac{\sigma_{11}}{\sigma_{22}^0}$ dans le milieu infini sont évaluées au point A (figure 3.1) - correspondant au point A₂ dans les travaux de [Shibata & Ono, 1978] - pour différentes valeurs de $\frac{1}{k}$ et différents contrastes de rigidité entre l'inclusion et le milieu infini définis par le rapport $m = \frac{E_I}{E_0}$, E_I et E_0 étant respectivement le module d'Young de l'inclusion et du milieu infini. Les coefficients de Poisson de l'inclusion ν_I et du milieu infini ν_0 sont tous deux égaux à $\frac{1}{3}$. Le cas $m = 0$ correspond à une cavité ; le cas $m = 1$ correspond à une inclusion ayant les mêmes propriétés mécaniques que le milieu infini (conduisant à un champ de contrainte homogène) tandis que $m > 1$ signifie que l'inclusion est plus rigide que le milieu environnant.

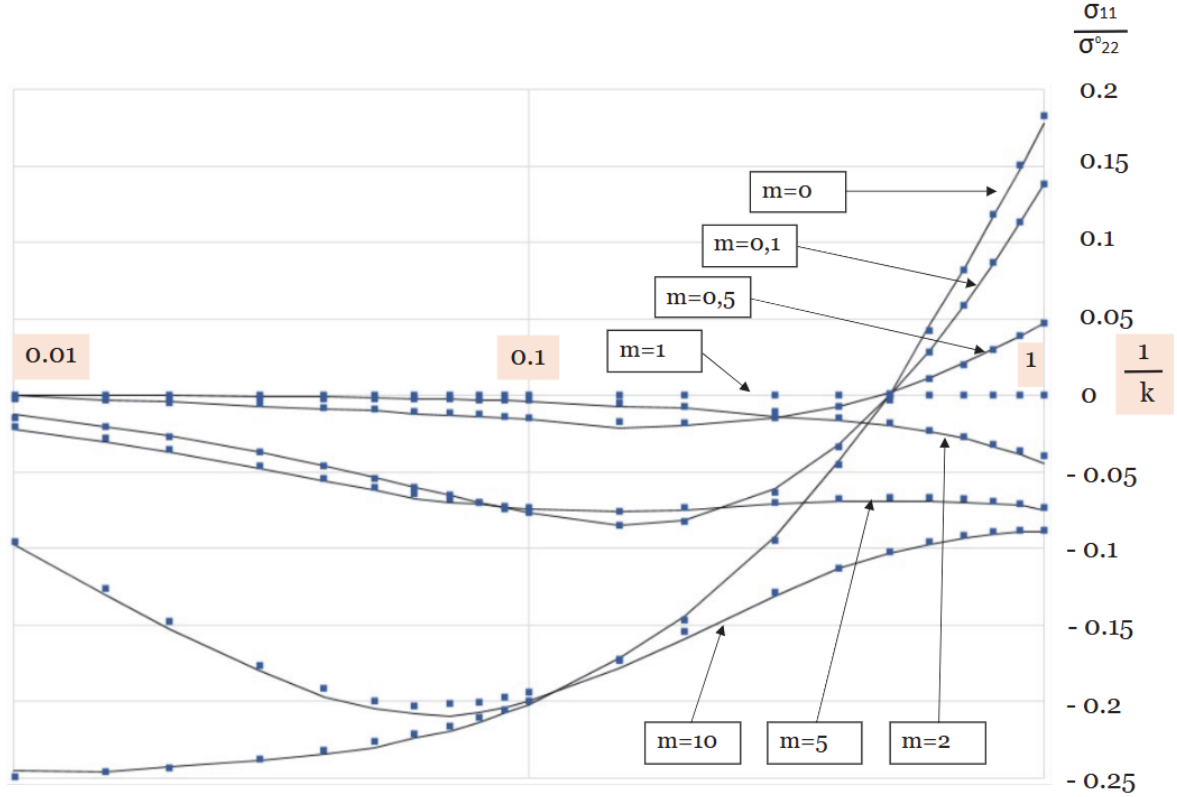


FIGURE 3.3 – *Oblate* - Composante σ_{33} du tenseur des contraintes dans la matrice au point A (figure 3.1), normalisée par la contrainte à l'infini σ_{22}^0 en fonction de $\frac{1}{k}$ pour différents contrastes de rigidité (m) - Comparaison entre les résultats du code EIM de la thèse (marqueurs carrés) et les résultats analytiques de Shibata & Ono (lignes, interpolées à partir de la figure 10 de [Shibata & Ono, 1978])

La figure 3.3 montre une très bonne corrélation entre les résultats du présent code EIM et les résultats analytiques de Shibata au point A, avec un écart absolu maximal de 0,008, soit un écart relatif maximal de 3,9%. La qualité de la corrélation est également excellente pour la composante σ_{11} au point B (écart absolu maximal de 0,006, soit un écart relatif maximal de 1,6%).

Les résultats ont également été vérifiés dans l'inclusion *Oblate* puisque [Shibata & Ono, 1978] ont également produit des abaques pour les contraintes internes à l'inclusion. Le chargement, les rapports de forme et les contrastes de rigidité sont définis de la même manière que pour la figure 3.3. La qualité de la corrélation est de même similaire avec pour les contraintes normales dans l'inclusion un écart absolu maximal de 0,004 (soit un écart relatif maximal de 3,5%) :

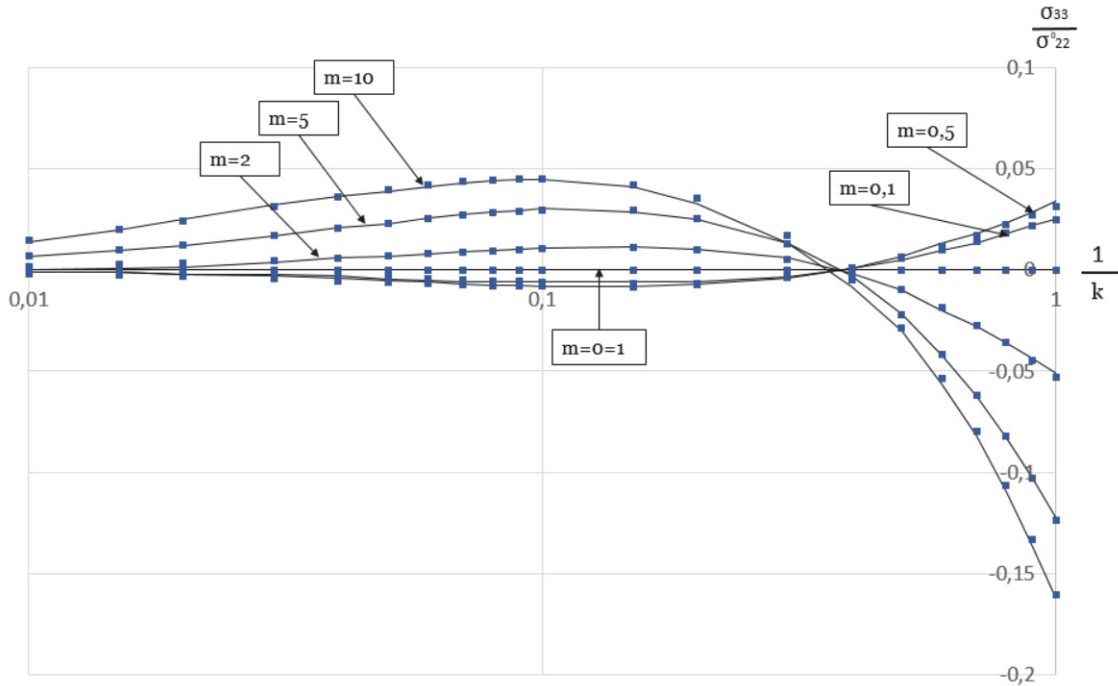


FIGURE 3.4 – *Oblate* - Contrainte σ_{33} dans l'inclusion normalisée par la contrainte à l'infini σ_{22}^0 en fonction de $\frac{1}{k}$ pour différents contrastes de rigidité (m) - Comparaison entre les résultats du code EIM développé dans la thèse (marqueurs carrés) et les résultats analytiques de Shibata & Ono (lignes, interpolées à partir de la figure 2 de [Shibata & Ono, 1978])

Ces premières évaluations tendent à prouver que le code EIM peut calculer correctement le champ des contraintes à l'intérieur de l'inclusion et à l'interface avec la matrice. Pour démontrer sa pertinence loin de l'inclusion, il n'y a pas de données analytiques de référence disponibles. Il faut donc construire des références Elements Finis auxquelles seront comparées les prédictions du Module EIM.

3.2 Chargement et Orientation spatiale

Jusqu'à présent, les premières évaluations ont visés à confronter la modélisation des sphéroïdes *Prolates* et *Oblates* à des abaques et des résultats existants afin de vérifier le bon fonctionnement des programmes dans des cas "simples". Toutefois, afin de démontrer le bon fonctionnement des modélisations dans les cas les plus complexes, il est nécessaire d'établir dès maintenant une convention par laquelle seront définis les chargements appliqués et l'orientation spatiale.

3.2.1 Chargements étudiés

Le repère x_i ; $i = \{1, 2, 3\}$, visible sur la figure 3.1 et attaché à l'ellipsoïde, est celui dans lequel les expressions théoriques de l'EIM ont été formulées. Dans la suite de cette thèse, ce repère sera qualifié de *repère morphologique*.

Si pour un même chargement global appliqué à l'infini, on veut pouvoir considérer des sphéroïdes d'orientations spatiales différentes par rapport à la direction de ce chargement, il est avantageux d'introduire un second système d'axes. On définit ainsi un repère fixe, attaché au milieu infini, dans lequel est défini le chargement appliqué à l'infini. Ce repère, qualifié de *global* est noté X_i ; $i = \{1, 2, 3\}$. Il est pris égal au repère morphologique de l'inclusion x_i ; $i = \{1, 2, 3\}$ lorsque aucune orientation spatiale de l'inclusion n'est considérée.

Les repères global et morphologique seront différents lorsqu'une orientation spatiale du sphéroïde sera considérée.

Les chargements étudiés dans la thèse sont les suivants :

- * Traction Uniaxiale : la direction de chargement correspond à l'axe de révolution du sphéroïde concerné avant orientation spatiale. Cela signifie qu'il s'agit de l'axe X_1 pour les *Prolates* et de l'axe X_3 pour les *Oblates*. Le tenseur de souplesse du milieu infini est utilisé pour exprimer le tenseur de déformation correspondant dans le repère global.
- * Extension Uniaxiale : l'axe d'extension correspond à l'axe de révolution du sphéroïde avant orientation spatiale, comme dans le cas précédent (axe X_1 pour les *Prolates*, axe X_3 pour les *Oblates*).
- * Glissement Simple : le glissement est imposé dans le plan normal à l'axe de révolution du sphéroïde avant son orientation spatiale, soit $(X_2; X_3)$ pour les *Prolates* et $(X_1; X_2)$ pour les *Oblates*.

Pour la traction uniaxiale, l'amplitude de contrainte considérée est toujours égale à 1 Pa. Pour l'extension uniaxiale et le glissement simple, l'amplitude de déformation imposée est toujours égale à 0.001. Dans la sous-section 3.4.2, le nombre figurant dans la colonne 'Load' du tableau 3.1 correspond à la seule composante non-nulle du tenseur de déformation exprimé dans le repère global.

3.2.2 Définition de l'orientation spatiale

Pour définir l'orientation spatiale du sphéroïde par rapport au système d'axe global qui est fixe, on utilise les angles d'Euler $[\psi \ \theta \ \varphi]$ (convention de Bunge). En raison de l'axisymétrie des ellipsoïdes étudiés, seuls deux angles indépendants (figure 3.5) sont nécessaires. L'approche de modélisation choisie est la suivante.

Pour la forme *Oblate* (respectivement *Prolate*), l'angle ψ en rouge sur la figure 3.5 (resp. θ), crée une rotation autour de l'axe de révolution initial, et θ en noir sur la figure 3.5 (resp. φ) correspond à l'angle entre l'axe de révolution initial et le nouvel axe de révolution. La projection de ce dernier sur le plan $(X_1; X_2)$ pour la forme *Oblate* (resp. le plan $(X_2; X_3)$ pour la forme *Prolate*) dépend de la valeur de ψ (resp. θ). Il est à noter que la valeur de φ n'a pas d'importance pour la forme *Oblate* car elle correspond à une rotation autour du nouvel axe de révolution. Cette dernière sera fixée à 0° pour l'orientation spatiale de cette forme dans la suite de la thèse. Pour la forme *Prolate*, la modélisation choisie implique quant à elle que $\psi = 0^\circ$.

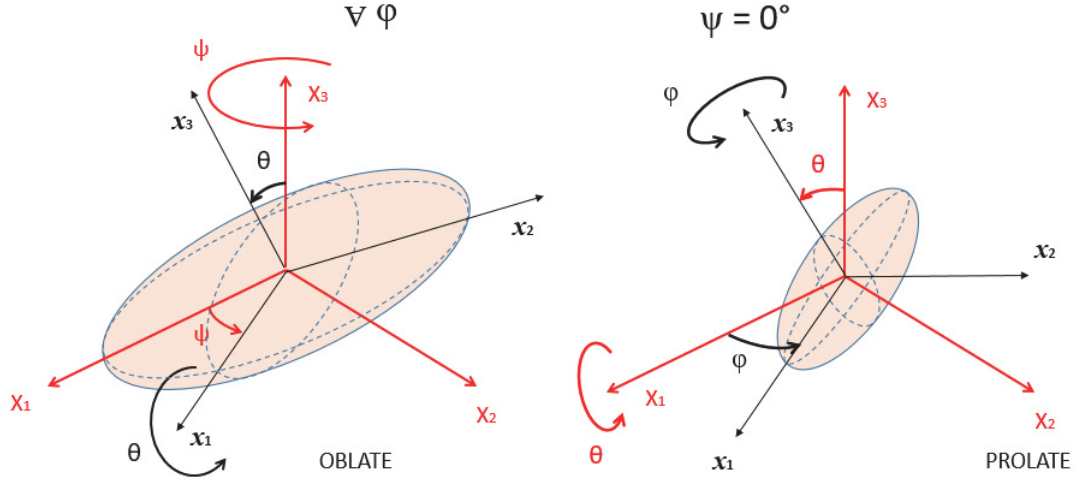


FIGURE 3.5 – Représentation schématisée des sphéroïdes *Oblate* et *Prolate* et de leurs systèmes d'axes associés. Le repère global (en rouge) rattaché au milieu infini est fixé. Le repère morphologique en noir est rattaché au sphéroïde. Les deux repères coïncident avant l'orientation spatiale du sphéroïde

La matrice de rotation R pour passer du repère global au repère morphologique est donnée par :

$$R = \begin{bmatrix} c_\psi c_\varphi - s_\psi c_\theta s_\varphi & -c_\psi s_\varphi - s_\psi c_\theta c_\varphi & s_\psi s_\theta \\ s_\psi c_\varphi + c_\psi c_\theta s_\varphi & c_\psi c_\theta c_\varphi - s_\psi s_\varphi & -c_\psi s_\theta \\ s_\theta s_\varphi & s_\theta c_\varphi & c_\theta \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

Avec $c_\psi = \cos(\psi)$, $s_\theta = \sin(\theta)$... La construction de cette matrice est donnée en Annexe C. Les règles de passage des tenseurs de second et quatrième ordre du repère global au repère morphologique sont :

$$\tilde{A}_{ij} = R_{ik}^T A_{kl} R_{lj} \quad \text{pour un tenseur d'ordre 2} \quad (3.21)$$

$$\tilde{\mathbb{A}}_{mnop} = R_{im} R_{jn} R_{ko} R_{lp} \mathbb{A}_{ijkl} \quad \text{pour un tenseur d'ordre 4} \quad (3.22)$$

Où la notation $(\tilde{\cdot})$ est utilisée lorsque le tenseur est exprimé dans le repère morphologique. L'équation (3.21) est utilisée pour déduire ε^0 , le tenseur de déformation à l'infini dans le repère morphologique requis par l'EIM, depuis le tenseur de déformation présent dans le repère global.

3.3 Description du modèle EF pour les évaluations

Afin d'évaluer le champ de contrainte donné par le code EIM hors de l'inclusion, les calculs EF sont utilisés comme référence. Les simulations EF ont été réalisées avec le logiciel Abaqus CAE 2017. Ce paragraphe aborde la façon dont les chargements ont été appliqués aux bords du domaine infini, puis la modélisation de ce domaine avec la façon de définir son maillage.

3.3.1 Application du chargement

La figure 3.6 illustre la manière dont sont appliqués les chargements définis à la sous-section 3.2.1 et les conditions aux limites aux bords extérieurs du domaine infini dans le modèle EF. Il est à noter que les chargements ont été pilotés en contraintes. Pour les chargements d'extension uniaxiale et de glissement simple, définis sous-section 3.2.1, les tenseurs de contrainte à appliquer ont été obtenus *via* le tenseur de rigidité du milieu infini. Pour la traction uniaxiale, (le long de l'axe X_3 par exemple sur la figure 3.6a), une densité surfacique de forces (pression) est prescrite sur la face externe normale à la direction de traction, tandis que les pressions sont imposées sur les faces normales aux trois axes en extension uniaxiale (le long de l'axe X_3 , figure 3.6b). Dans les deux cas, des conditions aux limites sont appliquées aux autres faces afin d'éviter les mouvements de corps rigide : les rotations et les déplacements anti-plans sont bloqués. Pour le glissement simple (dans le plan $(X_1; X_2)$ sur la figure 3.6c), les rotations et les déplacements anti-plans sont bloqués sur l'une des deux faces normales à X_3 , et un coin de cette face est encastré (le point noir sur la figure 3.6c).

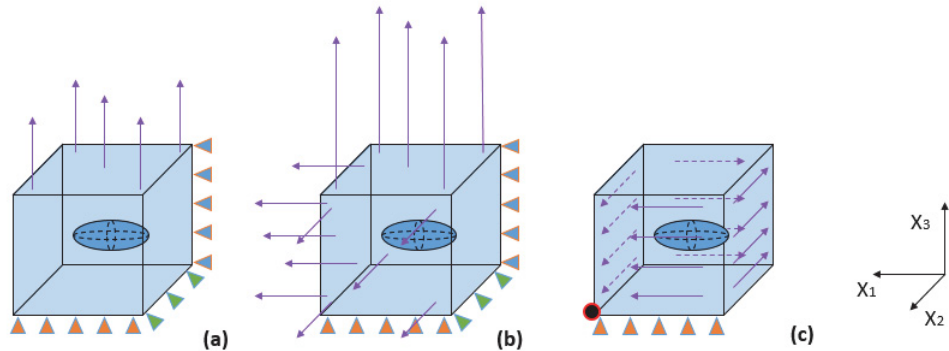


FIGURE 3.6 – Schéma de l'application des chargements et des conditions aux limites pour les simulations EF : Traction Uniaxiale (a) ; Extension Uniaxiale (b) ; Glissement simple (c)

3.3.2 Modélisation du milieu infini

Pour modéliser le domaine infini entourant l'inclusion, un domaine cubique de très grande taille contenant l'inclusion sphéroïdale en son centre a été considéré. La taille de ce domaine a été ajustée afin de retrouver le chargement imposé à l'infini. Pour les simulations effectuées dans le cas d'une cavité (sous-section 3.4.1), un domaine cubique de 120 x 120 x 120 mm de côté a été considéré. Pour les inclusions sphéroïdales orientées dans l'espace (sous-section 3.4.2 & sous-section 3.5), la taille du domaine cubique (200 x 200 x 200 mm de côté) a été définie comme étant 10 fois supérieure à la taille du sphéroïde *Oblate* dont le rapport de forme k est égal à 10 avec $a_1 = a_2 = 10$ mm et $a_3 = 1$ mm.

3.3.3 Définition du maillage

Un maillage tétraédrique à interpolation quadratique a systématiquement été employé (éléments C3D10).

Au fur et à mesure que le Module EIM gagnait en complexité, il a fallu réaliser des simulations EF plus fines pour valider les nouvelles évolutions du modèle. Un maillage fin et régulier n'était pas envisageable sauf à se retrouver avec plus de 30 millions d'éléments, ce qui aurait exigé l'emploi d'un super-calculateur pour chaque simulation de référence.

Pour les sphéroïdes isotropes non spatialement orientés, les simulations peuvent néanmoins profiter des symétries permettant de ne modéliser qu'un huitième de l'inclusion et de sa matrice environnante. La taille d'élément aux bords externes du domaine est dans ce cas de 5 à 10mm selon le rapport de forme, tandis que la taille d'élément sur les axes morphologiques du sphéroïde et l'interface avec la matrice varient de 0.05 à 0.25mm. Bien qu'important, "l'étalement" du gradient a été jugée correcte (figure 3.9b).

Une telle modélisation par huitième d'espace n'est plus possible dès lors que l'inclusion est spatialement orientée et/ou anisotrope. Le domaine cubique étant de taille dix fois supérieure à celle de l'inclusion, la nécessité de réduire le nombre d'éléments a conduit à développer une première architecture dénommée "*Matriochka*" servant en priorité à obtenir les contraintes dans l'inclusion. L'inclusion, dont la taille d'élément reste entre 0.05 et 0.25mm selon le rapport de forme est ici entourée par un premier cube dit interne. De côté égal à 2 à 3 fois le rapport de forme, ce cube interne est maillé avec des éléments entre 1 et 2mm et est obtenu par partitions successives du "milieu infini" original.

Les bords extérieurs du domaine cubique modélisant le milieu infini sont à comprendre comme étant les bords du cube externe et ont une taille d'élément comprise entre 4 et 6mm. Le gradient de taille d'élément entre les bords extérieurs des deux cubes interne et externe est très modéré ce qui permet d'avoir un maillage régulier dans le cube externe et d'économiser un grand nombre d'éléments par rapport à un maillage adaptatif comme l'illustre la figure 3.7.

Cependant si la structure "*Matriochka*" est adaptée pour obtenir rapidement la contrainte dans l'inclusion, elle ne permet pas de relever l'évolution des contraintes dans le milieu infini le long d'un axe, faute de concentrer suffisamment d'éléments de petite taille le long de l'axe en question. Il faut donc réaliser un partitionnement davantage "cloisonné" du modèle EF pour que les chemins de mesure ciblés soient maillés suffisamment finement pour avoir la précision requise.

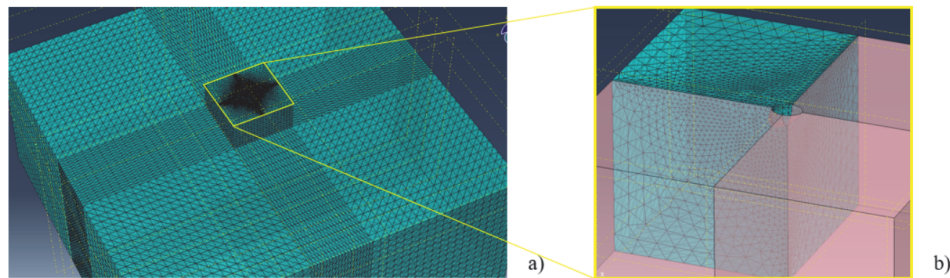


FIGURE 3.7 – Vue partielle du cube externe (a) et du cube interne au centre, de maillage bien plus fin. Zoom sur le cube interne cloisonné (b) avec mise en évidence de toute une zone de maillage fin dans le proche voisinage de l'interface et des chemins de mesure

Cette évolution architecturale est nommée "*Dupuy de Lôme*"¹ : le cube interne est alors subdivisé en 8 sous-éléments entourant l'inclusion. Lorsque les chemins de mesure d'intérêt sont les axes du repère global, (ayant pour intersection le centroïde de l'inclusion, que celle-ci soit orientée ou non), ces axes se voient imposer la même taille d'élément que l'inclusion. Les autres arêtes gardent quant à elles la taille d'élément du cube interne. Lorsque les chemins de mesure d'intérêt sont les axes morphologiques, le partitionnement du cube interne est modifié en conséquence (celui du cube externe restant inchangé). Cette dernière architecture légèrement différente est nommée *Dupuy de Lôme Dévié* (figure 3.8).

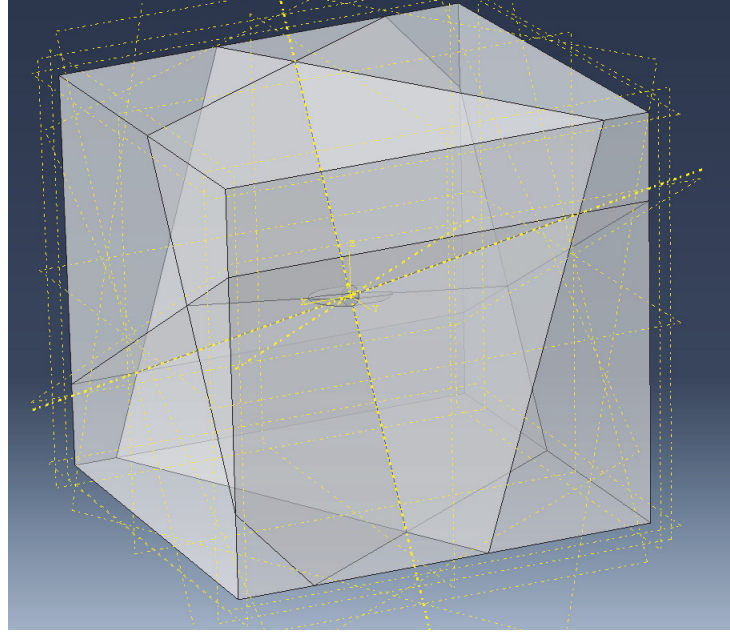


FIGURE 3.8 – Vue du cloisonnement du cube interne d'une structure *Dupuy de Lôme Dévié* avec en pointillés jaune les plans de coupe et les axes morphologiques du sphéroïde

Le calcul des plans et axes de partitionnement a été réalisé à part. Le nombre d'éléments dans chaque sous-structure est relativement similaire de même qu'entre les architectures *Dupuy de Lôme* et *Dupuy de Lôme Dévié*.

Des études de convergence de maillage ont également été réalisées. Lorsque les inclusions sont isotropes, la taille des mailles sur les trajets de mesure définis dans le milieu infini à partir de l'interface avec l'inclusion est de 0.02 mm, tandis que la taille est de 6 mm sur les bords extérieurs du domaine cubique (*i.e.* le cube externe). À titre d'illustration, l'annexe B fournit une étude de convergence dans l'un des cas les plus critiques.

1. Stanislas Charles-Henri Dupuy de Lôme (1816-1885) était un ingénieur naval français du Second Empire, connu entre autres réalisations pour avoir conçu le premier "vrai" cuirassé (frégate-cuirassé *La Gloire* (1860)) et un système de compartimentage par tranche appelé "compartimentage cellulaire" - qui a inspiré le nom de la structure EF - assez avancé pour son époque (croiseur protégé *Sfax* (1887))

3.4 Evaluation du module EIM pour des inclusions isotropes

Dans les sections 3.4 et 3.5, et pour plus de fluidité, le terme inclusion sera majoritairement employé en lieu et place du terme plus rigoureux d'inhomogénéité. Ce choix est quelque peu abusif puisque dans l'EIM l'inclusion désigne l'inclusion équivalente dotée des propriétés du milieu infini à laquelle on impose une déformation libre fictive modélisant l'inhomogénéité élastique considérée.

3.4.1 Cas d'une cavité non-orientée

Dans cette section, la fiabilité de notre code EIM est illustrée pour une cavité *Oblate* (sans orientation spatiale et rapport de forme $k = 5$) noyée dans un milieu infini élastique linéaire de propriétés matériau $E_0 = 210$ GPa et $\nu_0 = 0.3$ qui sont des valeurs classiques pour un matériau de type acier. Le chargement considéré à l'infini correspond à une traction uniaxiale telle que $\sigma_{33}^0 = 1$ Pa. Compte tenu de la symétrie du problème (géométrie et chargement) et comme évoqué dans la section précédente, un huitième du domaine cubique (120 x 120 x 120 mm de côté) est suffisant pour les simulations de référence par éléments finis. La figure 3.9 présente l'évolution de chacune des contraintes normales dans la matrice le long de l'axe morphologique x_3 à partir de l'interface. On rappelle que x_3 et X_3 coïncident lorsqu'il n'y a pas d'orientation spatiale comme c'est le cas ici. Dans la figure 3.9c, deux médaillons sont représentés pour agrandir à la fois le début et la fin des courbes EIM et EF. La figure 3.9b montre le raffinement du maillage autour de la cavité ainsi que le chemin de mesure pour les confrontations EIM-FEM dans le milieu infini environnant.

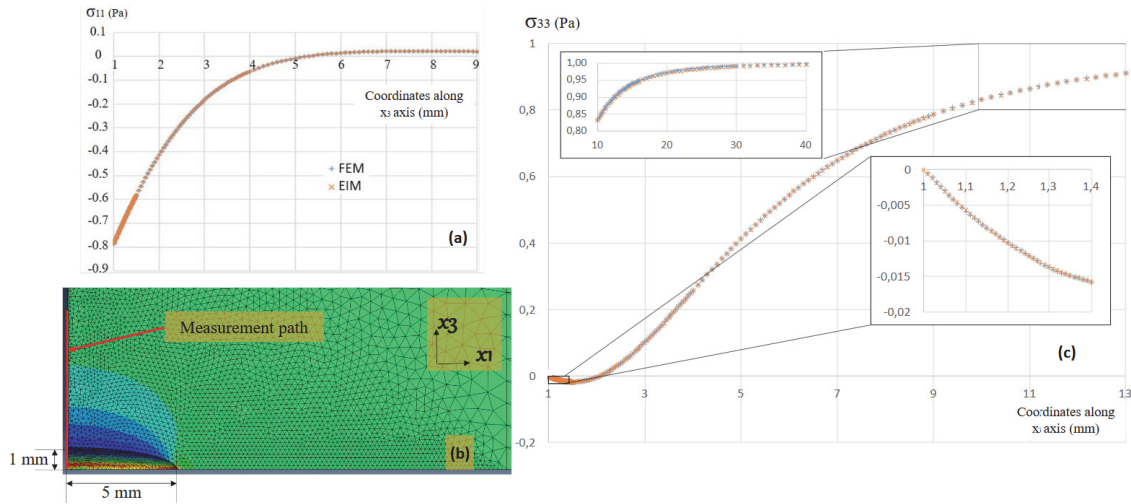


FIGURE 3.9 – Cavité *Oblate*, $k = 5$ - Evolution des contraintes normales $\sigma_{11} = \sigma_{22}$ (a), σ_{33} (c), dans le milieu infini le long de l'axe x_3 du repère morphologique et cartographie des valeurs atteintes par $\sigma_{22} = \sigma_{11}$ dans le plan $(x_1; x_3)$ (b). Les Résultats EIM et EF sont comparés dans le cadre d'une traction uniaxiale selon X_3 ($=x_3$ ici), telle que $\sigma_{33}^0 = 1$ Pa

La figure 3.9 montre une excellente corrélation entre les résultats EIM et EF, avec une erreur relative inférieure à 0.5%, sauf lorsque les valeurs de contrainte sont très proches de zéro, à savoir au tout début de la courbe sur la figure 3.9c et à environ 5 mm de l'interface sur la figure 3.9a.

3.4.2 Inclusion spatialement orientée

Dans cette section, on cherche à démontrer la pertinence des résultats EIM lorsqu'une orientation spatiale de l'inclusion (toujours isotrope) est considérée. Les propriétés élastiques du milieu infini sont fixées et identiques à la section précédente : $E_0 = 210$ GPa ; $\nu_0 = 0.3$.

D'un point de vue statistique [Myers, 1990 ; Oehlert, 2000 ; Bonamente, 2016], une validation correcte des résultats de l'EIM pour des inclusions isotropes orientées dans l'espace doit impliquer un nombre suffisant de comparaisons avec les solutions EF de référence par rapport au nombre de paramètres indépendants considérés (ici 4 : la forme, le chargement et les deux angles indépendants pour l'orientation spatiale). Ici, seuls les chargements d'extension uniaxiale et de glissement simple ont été considérés. Le tableau 3.1a récapitule, pour une inclusion isotrope avec un rapport de forme fixe ($k = 5$), l'ensemble des simulations réalisées à cette fin. Pour chaque calcul EIM, les composantes des contraintes à l'intérieur de l'inclusion et dans la matrice le long des trois axes globaux à partir de l'interface avec l'inclusion ont été confrontées aux valeurs EF correspondantes. Cette étude a été renouvelée pour différentes propriétés élastiques de l'inclusion (*i.e.* pour chaque ligne du tableau 3.1b).

Shape	Load	ψ	θ	φ				
Prolate	11	0°	0°	0°	E_I (in GPa)	ν_I	E_o (in GPa)	ν_o
		0°	0°	60°				
		0°	30°	30°				
	23	0°	0°	0°				
		0°	0°	60°				
		0°	30°	30°				
Oblate	33	0°	0°	0°				
		0°	30°	0°				
		45°	45°	0°				
	12	0°	0°	0°				
		0°	30°	0°				
		45°	45°	0°				

E_I (in GPa)	ν_I	E_o (in GPa)	ν_o
150	0,3	210	0,3
420	0,3		
1050	0,3		
150	0,2		
150	0,4		

TABLE 3.1 – Jeu de simulations réalisées pour la validation EIM à propriétés matériaux et rapport de forme ($k = 5$) fixés (a) et Propriétés matériaux considérées (b)

Dans chaque cas, la corrélation entre EIM et EF est très bonne tant dans l'inclusion qu'au dehors, à l'exception de quelques cas isolés détaillés ci-après.

Au sein de l'inclusion : L'erreur relative atteint un maximum de 7.3% lorsque les valeurs des composantes de contrainte examinées sont très faibles. Pour les composantes de contrainte dominantes, l'erreur relative maximale était de 0.98%, ce pour l'ensemble des simulations définies dans le tableau 3.1.

Hors de l'inclusion : L'écart relatif entre EIM et EF est maximum à proximité de l'interface avec l'inclusion, cela pour deux raisons : la première, de la même manière qu'à l'intérieur de l'inclusion, est liée à des valeurs très faibles de certaines composantes du tenseur des contraintes. La seconde est liée plus directement aux EF, la qualité de l'interpolation étant fortement réduite (même pour des maillages raffinés) lorsque le contraste de propriétés matériau entre l'inclusion et le milieu infini est élevé. Toutefois, l'écart absolu entre EF et EIM n'a jamais dépassé 8 MPa (erreur relative correspondante de 6%). Même dans le pire cas, les erreurs d'interpolation des éléments finis sont devenues négligeables à partir de 0.04 mm de l'interface.

Pour illustrer la qualité de la corrélation, la figure 3.10 présente les résultats comparés EIM/EF pour une inclusion *Oblate* isotrope spatialement orientée avec un rapport de forme plus élevé ($k = 8$) et pour le contraste de module d'Young le plus élevé du tableau 3.1b (troisième ligne). Une extension uniaxiale le long de l'axe global X_3 est appliquée à l'infini, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$. L'évolution de la contrainte équivalente de von Mises dans le milieu infini le long de l'axe global X_2 à partir de l'interface avec l'inclusion est montrée pour différentes orientations spatiales.

Dans le premier cas (courbes *bleues*), aucune orientation n'est considérée (c'est-à-dire que tous les angles d'Euler sont nuls); l'axe de révolution du sphéroïde *Oblate* coïncide avec l'axe de chargement. Dans le deuxième cas (courbes *vertes*), l'orientation spatiale conduisant à une différence entre la direction de chargement et le nouvel axe de révolution est introduite par l'intermédiaire d'un seul angle (θ). Dans le troisième cas (courbes *noires*), les angles ψ et θ sont tous les deux activés. On rappelle que l'angle φ n'a aucune influence sur l'orientation spatiale pour la forme *Oblate*.

Il convient de noter que le chemin de mesure pour les trois orientations spatiales considérées commence à l'interface avec l'inclusion sur l'axe global X_2 . Ainsi les points n'ont pas les mêmes coordonnées sur l'axe global X_2 (figure 3.10) mais ils sont situés à la même distance de l'interface dans les trois cas.

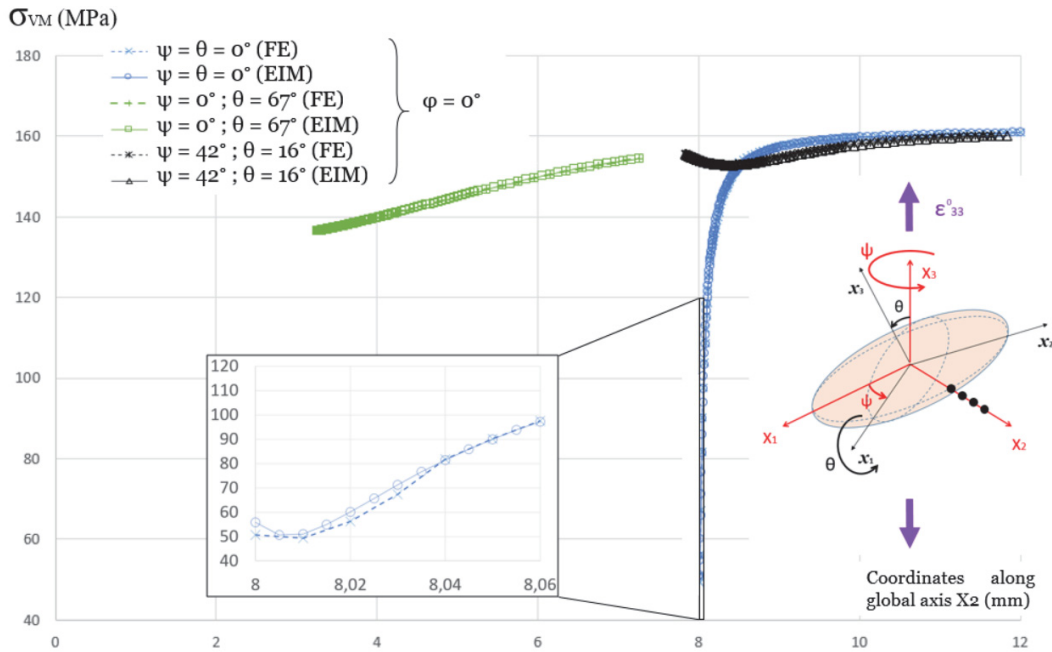


FIGURE 3.10 – *Oblate* ($k = 8$) isotrope - évolution de la contrainte équivalente de von Mises le long de l'axe global X_2 depuis l'interface avec l'inclusion pour différentes orientations spatiales ($[\psi = 0^\circ; \theta = 0^\circ; \varphi = 0^\circ]$ en bleu; $[\psi = 0^\circ; \theta = 67^\circ; \varphi = 0^\circ]$ en noir; $[\psi = 42^\circ; \theta = 16^\circ; \varphi = 0^\circ]$ en vert). Les résultats EIM et EF sont comparés pour une extension uniaxiale d'axe X_3 et d'amplitude $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$

Pour les orientations $[0^\circ \ 67^\circ \ 0^\circ]$ et $[42^\circ \ 16^\circ \ 0^\circ]$, la corrélation est excellente avec une erreur relative maximale de 0.03% et 0.05%, respectivement. Lorsqu'aucune orientation n'est considérée, l'axe de révolution de l'*Oblate* est colinéaire à la direction de chargement et la trajectoire de mesure commence précisément au point où l'acuité géométrique du sphéroïde est la plus élevée, ceci avec en plus un rapport de forme élevé. Cela conduit à une erreur relative de 10% en ce point qui diminue rapidement après 0.05 mm, comme

le montre le médaillon. Une telle erreur est due au fait que l'interpolation EF n'est pas suffisamment précise pour capturer le gradient de contrainte très sévère à proximité de l'interface dans ce cas, même avec un maillage raffiné. Cela confère à l'approche analytique EIM un avantage supplémentaire.

Les résultats de cette section ont illustré la pertinence des calculs EIM vis-à-vis des EF pour les sphéroïdes isotropes spatialement orientés. Ces résultats doivent maintenant être vérifiés dans le cas d'inclusions spatialement orientées et de nature anisotrope.

3.5 Evaluation du module EIM pour des inclusions anisotropes

3.5.1 Prise en compte de l'orientation cristallographique

Concernant le matériau : Le matériau choisi est un acier 316L. Le cristal, dont les paramètres sont ici repris de [Guilhem, 2011] comme dans [Bretin et *al.*, 2020], est bien connu pour sa forte anisotropie élastique, permettant de mettre en évidence l'influence de l'orientation cristallographique. Le tenseur de rigidité d'ordre 4 du cristal, noté \mathbb{C}_c et écrit dans le repère de la maille cristalline $\{c_1, c_2, c_3\}$, a la représentation matricielle 6x6 suivante avec la notation de Mandel [Bornert et *al.*, 2001]. Dans la suite de cette thèse, tous les tenseurs représentés selon cette convention seront identifiés par un $\hat{\cdot}$:

$$\hat{\mathbb{C}}_c = \begin{bmatrix} 197 & 125 & 125 & 0 & 0 & 0 \\ 125 & 197 & 125 & 0 & 0 & 0 \\ 125 & 125 & 197 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \times 122 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \times 122 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \times 122 \end{bmatrix} \quad \text{valeurs en GPa} \quad (3.23)$$

A propos de l'orientation cristallographique : Pour cette étude, nous voulons maximiser le contraste du module d'Young dans la direction de chargement entre l'inhomogénéité anisotrope et le milieu infini. Avec un acier 316L, donc un réseau cristallin de Fe à symétrie cubique, le module d'Young projeté sur une direction donnée, par exemple l'axe global X_1 , est donné par :

$$(E_{X_1})^{-1} = \hat{\mathbb{S}}_{11} - 2[\hat{\mathbb{S}}_{11} - \hat{\mathbb{S}}_{12} - \frac{1}{2}\hat{\mathbb{S}}_{44}] (l_1^2 m_1^2 + m_1^2 n_1^2 + n_1^2 l_1^2) \quad (3.24)$$

$\hat{\mathbb{S}}$ est la représentation de Mandel du tenseur de souplesse du cristal \mathbb{S} écrit dans le repère de la maille cristalline. Les scalaires m_1, n_1, l_1 sont respectivement le cosinus directeur entre les axes cristallographiques c_1, c_2, c_3 et l'axe global X_1 . La figure 3.12, extraite de [Zhang et *al.*, 2007], représente les projections du module d'Young sur toutes les directions de l'espace. On constate que les directions qui maximisent le module d'Young du cristal sont les trissectrices du repère cristallographique. Pour l'extension et la traction uniaxiales, le vecteur $(1 \ 1 \ 1)$ du repère cristallographique est donc choisi colinéaire à l'axe de chargement afin de maximiser le contraste du module d'Young entre l'inclusion anisotrope et le milieu infini isotrope dans la direction de chargement. Ainsi, sauf mention contraire l'orientation cristallographique sera $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$ pour la forme *Prolate* et $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$ pour la forme *Oblate*.

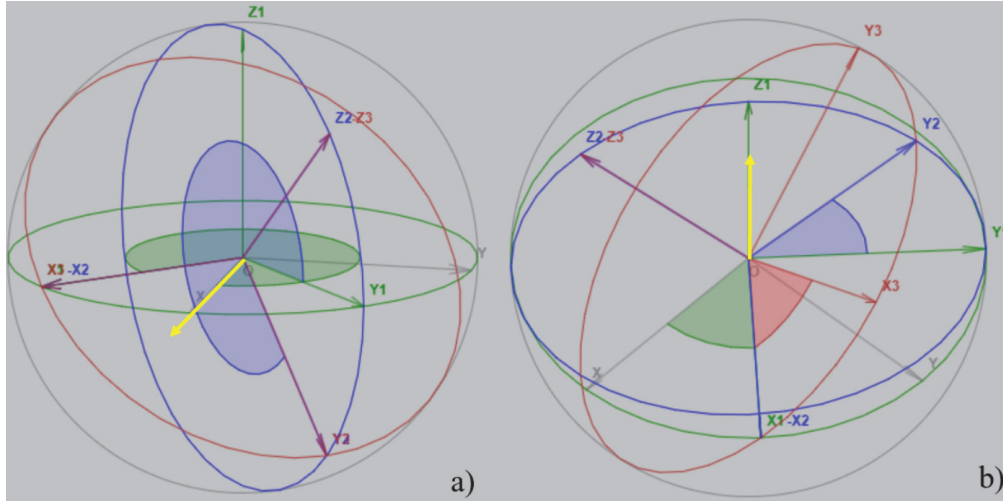


FIGURE 3.11 – Illustration de l'application des triplets d'angles d'Euler $[-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$ avec l'axe X_1 surligné en jaune (a) et $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$ avec l'axe X_3 surligné en jaune (b). Les axes cristallographiques sont en violet

source : [Animation Angle d'Euler, Université du Mans](#)

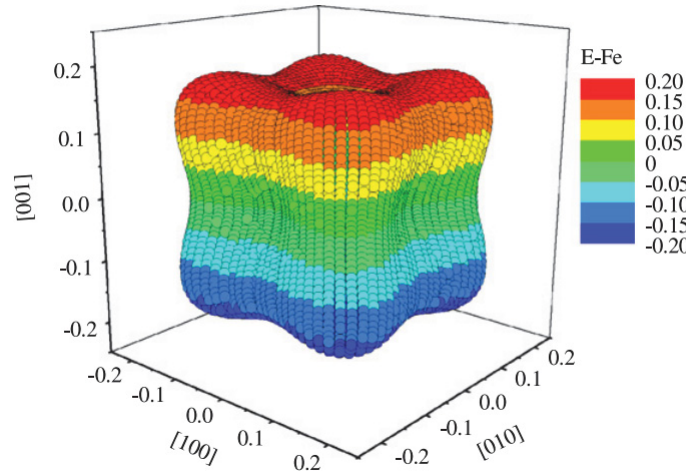


FIGURE 3.12 – Représentation 3D du module d'Young du Fer projeté dans toutes les directions (unité : 10^{12}N/m^2) dans le repère de la maille cristalline. Figure extraite de [Zhang et *al.*, 2007])

L'orientation cristallographique est définie à l'aide des angles d'Euler $[\psi_C \theta_C \varphi_C]$ selon la convention de Bunge. La matrice de passage du repère de la maille cristalline au repère global, notée R^C , est donnée par l'équation (3.20) avec les angles $[\psi_C \theta_C \varphi_C]$. Le tenseur de rigidité du cristal dans le repère global, \mathbb{C}_{Ig} , est alors déduit de \mathbb{C}_c avec la relation (3.22) et la matrice de passage R^C . De la même manière, la relation (3.22) avec la matrice R donnée par (3.20) est utilisée pour transcrire \mathbb{C}_{Ig} dans le repère morphologique. Le tenseur \mathbb{C}_I résultant est ainsi écrit dans le repère permettant son emploi dans l'algorithme EIM.

3.5.2 Procédure d'appel du module EIM dans le cas général

```

1 Algorithme : EIM pour sphéroïde spatialement orienté de nature isotrope ou
   anisotrope
   Input :
   - Tenseur de rigidité du milieu infini  $\mathbb{C}_0$ 
   - Chargement à l'infini dans le repère global
   - Forme de l'inclusion sphéroïdale (Prolate/Oblate/Sphère),
   - Rapport de forme ( $k$ ),
   - Nature de l'inclusion (Isotrope / Anisotrope),
   - Orientation spatiale de l'inclusion ( $[\psi \ \theta \ \varphi]$ ),
   - Tenseur de rigidité  $\mathbb{C}_I$  (si l'inclusion est isotrope) - Tenseur de rigidité  $\mathbb{C}_c$  dans
   le repère cristallographique et Orientation Cristallographique  $[\psi_C \ \theta_C \ \varphi_C]$  (si
   l'inclusion est anisotrope)
   - Coordonnées du(des) point(s) de mesure (dans le repère global, dans ou hors de
   l'inclusion)

   Output : champ local de contrainte et de déformation dans l'inclusion et au(x)
   point(s) de mesure dans le milieu infini, écrits dans le repère global

2 if Inclusion Anisotrope then
3   | Calcul de la matrice de passage  $R^C$ , (Équation (3.20) avec  $[\psi_C \ \theta_C \ \varphi_C]$ )
4   | Écriture du tenseur de rigidité dans le repère global  $\mathbb{C}_{Ig}$ , (Équation similaire à
   | (3.22) avec  $R^C$ )
5 end if

6 for  $[\psi \ \theta \ \varphi]$  do
7   | Calcul de la matrice de passage  $R$ , (Équation (3.20))
8   | Écriture du chargement appliqué  $\varepsilon^0$  dans le repère morphologique (via
   | Équation (3.21))
9   | if Inclusion Anisotrope then
10  | | Écriture du tenseur de rigidité dans le repère morphologique  $\mathbb{C}_I$ , (Équation
   | | (3.22) avec  $R$ )
11  | end if
12  | Calcul des coordonnées du(des) point(s) de mesure dans le repère
   | morphologique,
13  | Appel de la fonction EIM ( $k$ ,  $\mathbb{C}_I$ ,  $\mathbb{C}_0$ ,  $\varepsilon^0$ , coordonnées morphologiques du(des)
   | point(s) de mesure),
14  | Ecriture du champ de contrainte et de déformation, dans le repère global
   | (depuis le repère morphologique) avec la matrice de passage  $R^{-1}$ 
15 end for

```

Algorithme 3.1 : Principe général du module EIM

Principe de la fonction EIM : Pour une inhomogénéité ellipsoïdale I , et un milieu infini isotrope, linéaire élastique, chargé à l'infini par le tenseur ε^0 . Le tenseur d'Eshelby est appelé *via* (3.7), les A_i et A_{ij} étant calculés pour la forme sphérique (respectivement *Prolate* puis *Oblate*) grâce à (3.11) (respectivement (3.15) puis (3.18)).

ε^* est alors déterminé par (3.5) et ε_I par (3.4)

$\mathbb{D}(x)$ est alors obtenu *via* (3.9), les $B_I(\lambda)$ et $B_{IJ}(\lambda)$ étant calculé pour la forme sphérique (respectivement *Prolate* puis *Oblate*) grâce à (3.12) (respectivement (3.16) puis (3.19)).

$\varepsilon(x)$ est alors déterminé par (3.8) et les tenseurs de contrainte correspondants, dans et hors de l'inclusion, sont donnés par la loi de Hooke :

$$\begin{cases} \sigma_I &= \mathbb{C}_I : \varepsilon_I \\ \sigma(x) &= \mathbb{C}_0 : \varepsilon(x) \end{cases} \quad (3.25)$$

3.5.3 Confrontation EIM *vs* EF

L'objectif de cette section est d'illustrer la fiabilité des résultats EIM en les comparant aux résultats EF à l'intérieur et à l'extérieur de l'inclusion, désormais spatialement orientée *et* de nature anisotrope (l'orientation cristallographique étant ici indépendante de l'orientation spatiale). A cet effet, nous choisissons l'exemple d'une inclusion *Oblate*. Le chargement appliqué à l'infini est une extension uniaxiale le long de l'axe global X_3 , tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$. Le milieu infini est élastique linéaire isotrope avec $E_0 = 196.43$ GPa et $\nu_0 = 0.28$, correspondant aux propriétés mécaniques d'un agrégat homogénéisé de 316L [Bretin et *al.*, 2019a; Bretin et *al.*, 2019b]. Le tenseur de rigidité de l'inclusion dans le repère de la maille cristalline est donné par l'équation (3.23). L'orientation cristallographique $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$ est choisie afin de maximiser le contraste de module d'Young dans les trois directions du repère global, et notamment dans la direction d'extension comme expliqué dans la sous-section 3.5.1. La figure 3.13 représente l'évolution de la contrainte de von Mises au centroïde de l'inclusion (le champ de contrainte restant toujours homogène au sein de l'inclusion anisotrope, [Mura, 1987]) en fonction de θ (l'inclinaison du sphéroïde par rapport à la direction d'extension). L'angle θ varie de 0 à 90° et les autres angles ψ et φ sont nuls. L'étude est menée pour différents rapports de forme k . Chaque rapport de forme ($k = 1, 2, 5, 8$) est associé à une couleur spécifique (bleu, orange, noir et rouge, respectivement).

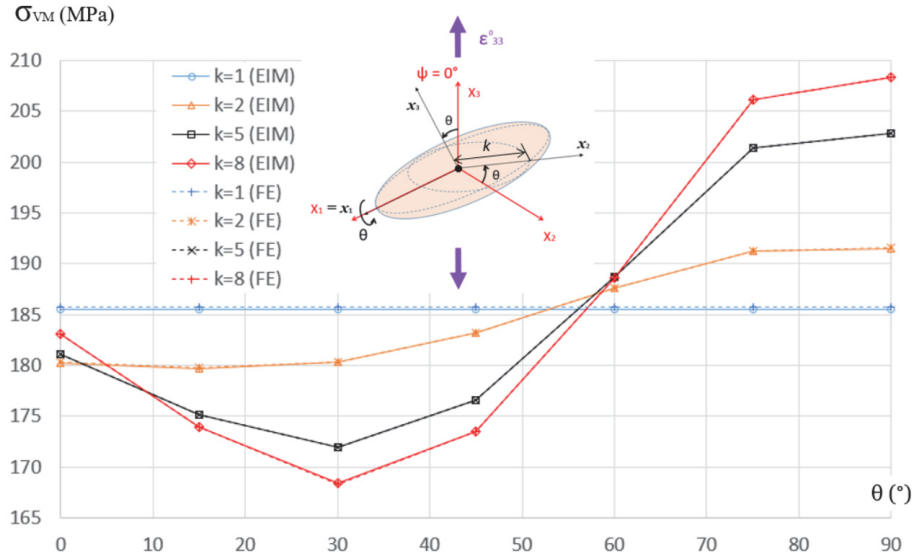


FIGURE 3.13 – *Oblate* anisotrope (ori. cristalline : $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$) - évolution de la contrainte équivalente de von Mises au centroïde de l'inclusion en fonction de θ ($\psi = \varphi = 0$), pour 4 rapports de forme ($k = 1$ en bleu ; $k = 2$ en orange ; $k = 5$ en noir ; $k = 8$ en rouge). Les résultats EIM (marqueurs évidés) et EF (marqueurs en croix) sont comparés en extension uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$

Comme le montre la figure 3.13, l'accord entre les prédictions EIM (marqueurs évidés) et les simulations EF (marqueurs en croix) est excellent quelle que soit la valeur de k , avec une erreur relative maximale de 0,082% (obtenue lorsque $k = 1$). La même précision a été obtenue pour chaque composante du tenseur des contraintes. Comme prévu, les résultats pour la sphère ne sont pas sensibles à l'orientation spatiale dont l'influence augmente avec le rapport de forme de l'inclusion.

Afin d'illustrer la précision des résultats EIM dans la matrice environnante, la figure 3.14 montre l'évolution de la contrainte de von Mises en fonction de la distance à l'interface de l'inclusion le long de l'axe global X_2 . Comme sur la figure 3.13, seul θ est activé. Trois courbes correspondant à trois valeurs arbitraires de θ (7° en bleu, 45° en rouge et 90° en gris) sont tracées. Le début des courbes est agrandi dans le médaillon, au voisinage de l'interface avec l'inclusion.

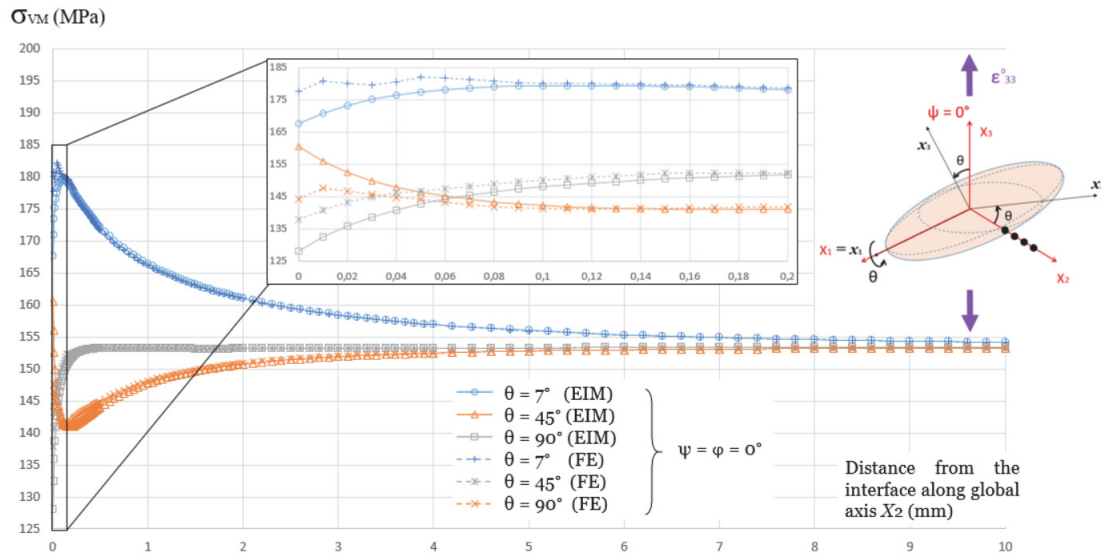


FIGURE 3.14 – *Oblate* anisotrope (ori. cristalline : $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$) et $k = 5$ - évolution de la contrainte équivalente de von Mises en fonction de la distance à l'interface avec l'inclusion, le long de l'axe global X_2 , pour différentes orientations spatiales ($\theta = 7^\circ$ en bleu ; $\theta = 45^\circ$ en orange ; $\theta = 90^\circ$ en gris). Les résultats EIM (marqueurs évidés) et EF (marqueurs en croix) sont comparés en extension uniaxiale, telle que $\epsilon_{33}^0 = 0.001$ au centroïde de l'inclusion

Comme le montre le médaillon de la figure 3.14, les premiers points ne sont pas bien corrélés, avec une erreur relative atteignant 11,4%. Ce phénomène est localisé à proximité de l'interface sur une courte distance de 0.2 mm au maximum. Le caractère erratique de l'évolution obtenue par les EF, comparée à l'évolution régulière obtenue par l'EIM, montre clairement que l'erreur provient de la simulation EF, une fois de plus incapable de capturer le sévère gradient de contrainte près de l'interface avec le maillage réalisé. Cependant, contrairement à la sous-section 3.4.2 pour une inclusion isotrope spatialement orientée, l'erreur est assez similaire pour les trois orientations spatiales étudiées. Cela montre que le gradient de contrainte, et l'imprécision consécutive de la simulation EF au voisinage de l'interface, sont ici plutôt dus au fort contraste de propriétés entre l'inclusion anisotrope et le milieu infini, alors qu'ils étaient majoritairement gouvernés par des effets géométriques dépendant de l'orientation spatiale sur la figure 3.10.

3.6 Intégration du module EIM dans le modèle de Bretin

Le module EIM est donc capable de donner le tenseur des contraintes en un point arbitraire, dans ou hors d'une inhomogénéité anisotrope, de forme, rapport de forme, orientation spatiale et orientation cristallographique fixés pour un chargement donné. Il reste désormais à l'intégrer au modèle de Bretin où il doit remplacer la base de données EF.

Cette section, après avoir rappelé le principe de fonctionnement du modèle de Bretin, va donc s'attacher à la façon dont la base de données a été remplacée par le module EIM et à la validation qui a suivi.

3.6.1 Rappels sur le modèle de Bretin

Le modèle de Bretin a été décrit en détail au chapitre 2, section 2.3. Ici vont être faits quelques rappels afin de clarifier le rôle joué par la base de données EF et l'importance de son remplacement par un module de calcul analytique.

- ★ Quel est le but du modèle de Bretin ?

Le modèle de Bretin a été développé pour modéliser explicitement les effets de voisinage au sein d'un polycristal composé de grains élastiques linéaires anisotropes, en considérant en première approche un agrégat de Kelvin. Pour ce faire, Bretin a posé deux hypothèses (chapitre 2, sous-section 2.3.1) : d'une part l'effet de voisinage est indépendant de l'orientation cristallographique du grain d'intérêt et d'autre part, l'effet de voisinage de chaque grain peut être décomposé comme la somme individuelle des effets de chaque voisin composant ce voisinage.

- ★ Quel est le lien entre l'effet de voisinage et la base de données ?

Du fait des deux hypothèses précédentes, l'effet de voisinage peut être compris comme la somme des effets de chaque voisin sur un point donné de l'espace, en l'occurrence, le centroïde du grain d'intérêt. Vu que le modèle de Bretin utilise un agrégat de Kelvin, tous les grains ont la même forme, la même taille, le même nombre de voisins qui sont placés aux mêmes positions relatives. L'effet de voisinage sera donc uniquement dépendant de l'orientation cristallographique des voisins. Il y a 40 OC disponibles dans la base de données (chapitre 2, sous-section 2.2.3) qui sont aléatoirement attribuées aux différents grains. La base de données contient l'effet du voisin pour chaque position relative et chaque OC disponible, ce qui permet de reconstituer facilement l'effet de voisinage complet.

- ★ En quoi cette base de données est problématique ?

Cette base de données a été construite par 560 simulations EF (14 positions relatives \times 40 orientations cristallographiques différentes). De ce fait, le modèle de Bretin n'est donc pas autonome dans son utilisation puisque des calculs EF élémentaires préliminaires sont requis, ce qui annule en partie l'avantage d'un temps de calcul très court offert par l'AC. De plus, la base de données n'incorpore que 40 orientations cristallographiques et reste spécifique à la forme et à la position relative des voisins dans un agrégat de Kelvin, ce qui n'est pas compatible avec les évolutions envisagées vers des microstructures plus complexes. Ces limites sont donc à l'origine de la volonté de disposer d'un module analytique pouvant calculer pour chaque voisin, l'effet qu'il peut avoir sur un point de l'espace, afin de ne plus dépendre d'une base de données.

3.6.2 Remplacement de la base de données par le module EIM

Dans un premier temps, la structure de Kelvin est conservée et avec elle, les formes identiques ainsi que le même nombre et les mêmes positions relatives pour les voisins. Ce qui change par rapport au modèle de Bretin est le fait que l'effet du voisin sur un point de l'espace (à savoir la position du centroïde du grain d'intérêt) est calculé analytiquement par le module EIM, l'octaèdre tronqué étant approximé par une sphère pour permettre l'utilisation de la théorie d'Eshelby. Les étapes de ce nouveau modèle appelé désormais Bretin-EIM restent identiques à celles du modèle original de Bretin (chapitre 2, sous-section 2.3.3). La modification majeure concerne les calculs élémentaires impliqués dans la loi de transition locale de l'AC (chapitre 2, sous-section 2.3.2). La déformation au centroïde d'un grain A reste ainsi calculée *via* la formule 3.26 (issue des équations 2.5, 2.6, 2.7 du chapitre 2, sous-section 2.3.1), illustrée par la figure 3.15 :

$$\varepsilon_{\{Bi\}}^A = \varepsilon_{eff}^A + \sum_{i=1}^N \Delta \varepsilon_{Bi}^{Aeff} \quad (3.26)$$

où ε_{eff}^A est la déformation du grain A isolé dans le milieu infini pourvu des propriétés du milieu effectif (sans effet de voisinage donc) obtenue *via* la théorie d'Eshelby en approchant l'octaèdre tronqué par une sphère comme auparavant. $\Delta \varepsilon_{Bi}^{Aeff} = \varepsilon_{Bi}^{Aeff} - \varepsilon_0^{Aeff}$ étant quant à elle, l'influence individuelle du voisin Bi , calculée directement "*online*" par le module EIM et non plus extraite d'une base de données construite en "*offline*" par des simulations EF. Le principe - illustré par la figure 3.15 ci-dessous - est appliqué à l'ensemble des grains de l'agrégat.

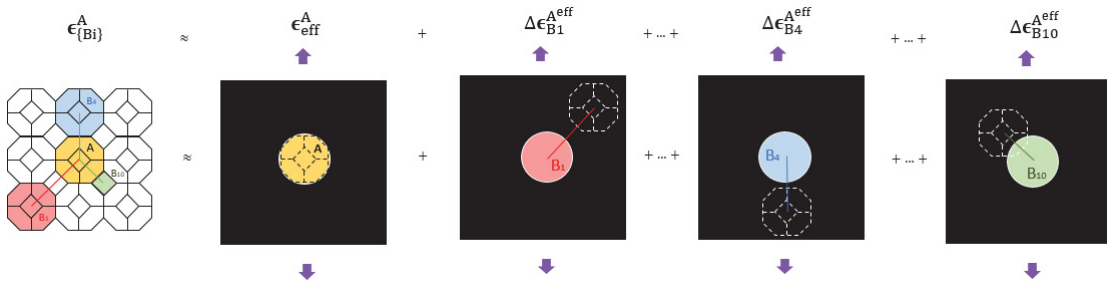


FIGURE 3.15 – Calcul de l'effet de voisinage d'un grain A au sein d'un agrégat de Kelvin selon le modèle de Bretin avec un focus sur 3 voisins parmi les 14 voisins directs

On notera que chacun des calculs élémentaires effectués par le module EIM est réalisé dans le repère morphologique du grain Bi dont l'origine est le centroïde de ce grain. La déformation ε_{Bi}^{Aeff} est donc calculée au point du milieu infini correspondant à la position du centroïde du grain A (dans le repère morphologique du grain Bi). Les résultats sont ensuite transférés dans le repère global où est effectuée la sommation décrite figure 3.15.

C'est là une autre différence avec le modèle original de Bretin, qui calcule la moyenne des déformations dans l'espace occupé par le grain A et affecte le résultat au point correspondant à la position du centroïde du grain A . Il y a donc une modification de la méthode de calcul, mais aussi de la règle de transition. Pourquoi ce changement, alors que le calcul ponctuel ne capte l'effet du voisin qu'au centroïde en ignorant son influence sur le reste du grain ? En fait, ce choix a été fait avec en arrière-plan l'idée de développer plus tard une grille de mesure permettant de relever les valeurs dans tout le grain, faisant du modèle une solution proche des solutions champs complets tout en ayant aussi la possibilité de réaliser une moyenne volumique.

3.6.3 Validation

Après avoir rappelé le rôle de la base de données dans le modèle de Bretin ainsi que ses limites, la manière dont le module EIM a été incorporé pour remplacer cette base de données a été expliquée. Il reste donc à montrer que le modèle modifié (et nommé Bretin-EIM désormais) reste capable de prédire correctement le champ local aux centroïdes des grains. A cet effet, des simulations champs complets ont été mises en place.

A des fins d'économies de temps de calcul, on considère un agrégat de 54 octaèdres tronqués, c'est-à-dire une structure de Kelvin de 3 grains par côté. Ce dernier est illustré figure 3.16c. L'agrégat est incorporé dans un cube externe de taille (110 x 110 x 110) mm de côté, ce qui correspond approximativement à un peu plus de dix fois les dimensions de l'agrégat. Dans le modèle Bretin-EIM, chaque octaèdre de l'agrégat de Kelvin est approché par une sphère.

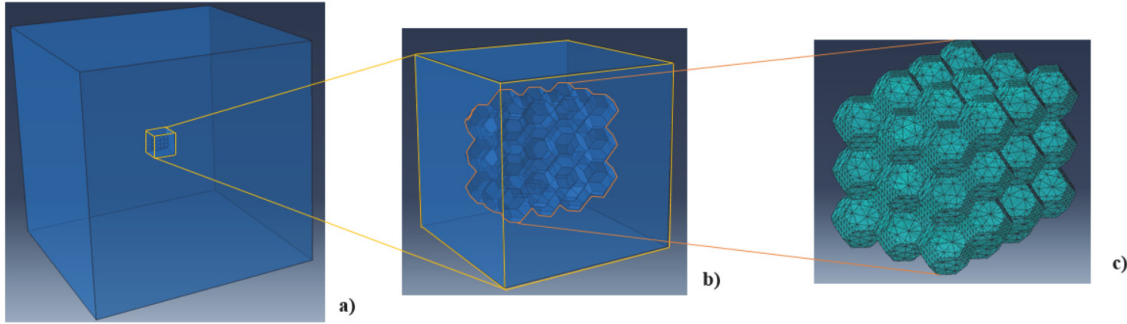


FIGURE 3.16 – Illustration des 54 octaèdres tronqués noyés dans le milieu effectif (a), avec seul le cube interne visible (b), (structure *Matriochka*, voir section 3.3) et isolés sans milieu effectif (c)

Ainsi afin d'ouvrir la discussion et tenter d'appréhender l'erreur commise par cette seule approximation, un second agrégat constitué de 54 grains sphériques a été construit (et incorporé dans un cube externe de mêmes dimensions (110 x 110 x 110) mm de côté, ce qui correspond là aussi à environ dix fois la taille de l'agrégat). Les centroïdes sont disposés selon une structure cubique centrée (figure 3.17). Il est à noter que les centroïdes des grains ne peuvent pas être strictement aux mêmes endroits pour les deux agrégats : la distance inter-centroïdes entre deux octaèdres tronqués le long d'une trissectrice est de 1mm et de 2mm dans une direction colinéaire aux axes X_i ($i \in \{1, 2, 3\}$). Le premier cas implique des sphères de rayon 0.5mm contigües tandis que le deuxième implique des sphères de rayon 1mm, elles aussi contigües.

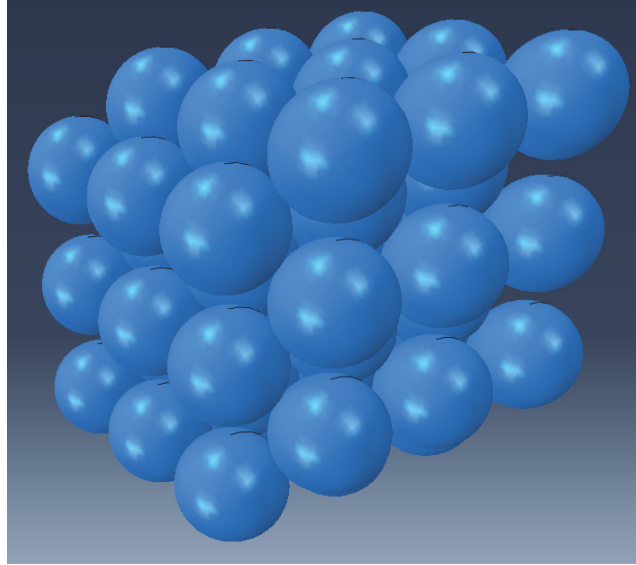


FIGURE 3.17 – Illustration des 54 sphères, ordonnées en structure cubique centrée, pour laquelle la disposition des centroïdes est la plus proche possible de celle obtenue avec les octaèdres tronqués

Deux chargements ont été considérés : une extension uniaxiale et un glissement simple de même amplitude ($\varepsilon^0 = 0.001$), (se reporter sous-section 3.2.1 pour plus de détails). Ces chargements sont appliqués aux frontières extérieures du domaine cubique (*i.e.* les bords du cube externe) dont le principe est défini sous-section 3.2.1.

Concernant le maillage, l'architecture utilisée sera une structure "*Matriochka*" (section 3.3) avec un cube interne de dimensions (11 x 11 x 11) mm de côté englobant l'agrégat, ceci tant pour l'agrégat d'octaèdres tronqués que pour l'agrégat de grains sphériques. Les grains (octaèdres tronqués et sphères) ont une taille d'élément de 0.05 à 0.2mm tandis que le cube interne a une taille d'élément entre 1 et 2mm. Le fort gradient de taille d'élément entre les bords de l'agrégat et les bords du cube interne est supposé ici sans conséquences.

On utilisera ici les tenseurs de rigidité de la maille cristalline et du milieu effectif calculés par [Bretin, 2020] (sous-section 3.5.1). Pour chaque grain, une orientation cristallographique a été générée aléatoirement par un couple de quaternions, lequel est converti ensuite en angles d'Euler. Chaque agrégat a donc une unique distribution d'OC aléatoires.

54 grains ne sont clairement pas suffisants pour modéliser une microstructure réaliste (la distribution des OC n'étant pas assez fournie pour que le milieu effectif puisse être considéré isotrope), mais le but ici n'est pas de reconstituer une microstructure crédible mais de comparer les résultats fournis par Bretin-EIM et les simulations EF de référence à modélisation identique. Pour cette comparaison, cette taille d'agrégat est ici considérée comme acceptable.

Il est décidé de réaliser une première comparaison entre les prédictions de le modèle de Bretin-EIM et l'agrégat EF d'octaèdres tronqués, visible figure 3.18, qui possède une structure compacte et les mêmes emplacements de centroïdes (au contraire de l'agrégat EF de sphères).

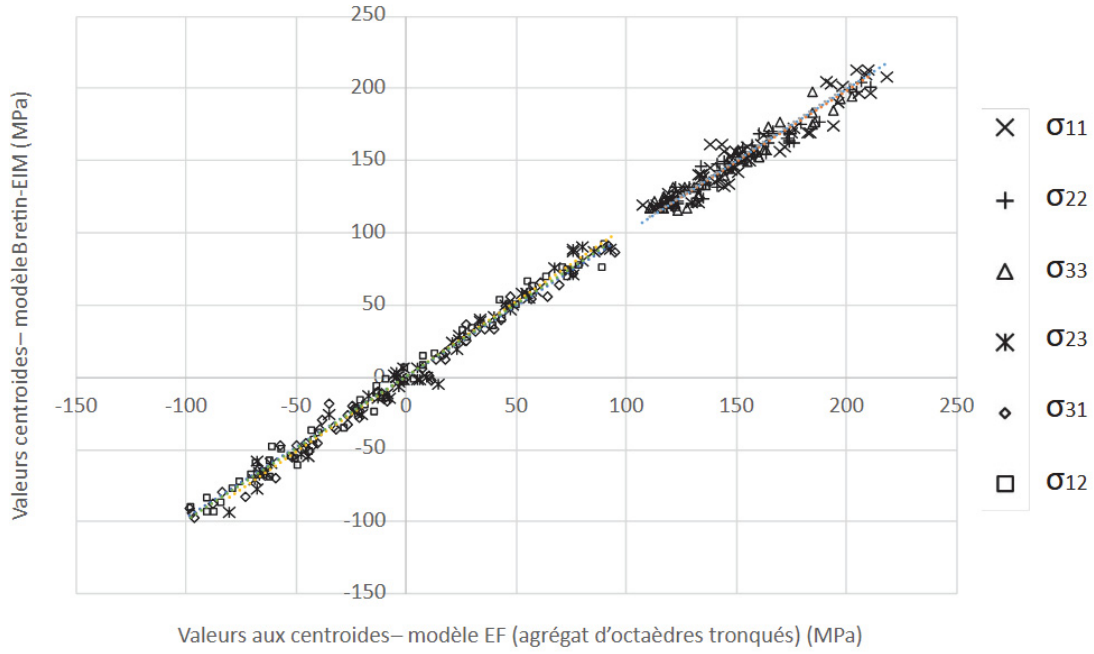


FIGURE 3.18 – Corrélation des différentes composantes de contrainte au niveau du centroïde de chacun des 54 grains de l'agrégat (chargé en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) entre - en abscisses - les valeurs de référence EF (agrégat d'octaèdres tronqués) et - en ordonnées - les valeurs prédites par Bretin-EIM

Les différentes composantes du tenseur des contraintes relevées au centroïde des 54 grains de l'agrégat de validation sont observables sur la figure 3.18. La corrélation des valeurs simulées par EF (agrégat d'octaèdres tronqués, visible en abscisses) et celles prédites par le modèle de Bretin-EIM (en ordonnées) est bien visible. La dispersion des valeurs est faible, la théorie analytique d'Eshelby et les différentiels de déformation - eux aussi analytiques - générés par chaque voisin sont confrontés à une interpolation du champ local sur tout l'agrégat. Les faibles écarts prouvent donc la capacité du modèle de Bretin-EIM à correctement estimer le champ local *aux centroïdes des grains* d'un agrégat de Kelvin et à fonctionner de manière satisfaisante en totale autonomie.

Si l'erreur est faible, elle est néanmoins non-nulle. La question de l'erreur commise par l'approximation de la forme sphérique par les octaèdres tronqués se pose donc. La figure 3.19 compare alors les contraintes aux centroïdes dans les agrégats EF de sphères et d'octaèdres tronqués.

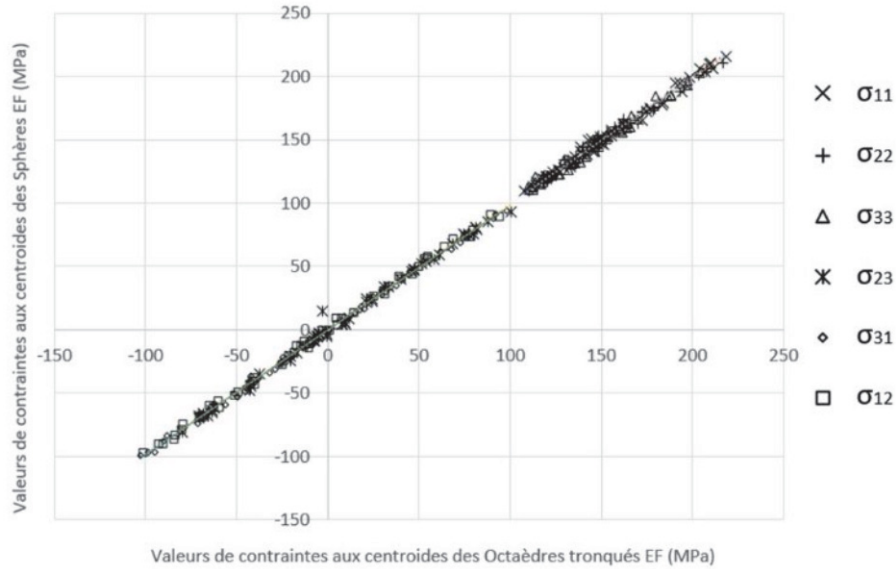


FIGURE 3.19 – Corrélation des différentes composantes de contrainte au niveau du centroïde de chacun des 54 grains de l’agrégat (chargé en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) entre - en abscisses - l’agrégat EF d’octaèdres tronqués et - en ordonnées - l’agrégat EF de sphères

La figure 3.19 compare les différentes composantes du tenseur des contraintes obtenues par EF et relevées aux centroides des 54 grains pour les deux types d’agrégats. La corrélation des valeurs entre l’agrégat d’octaèdres tronqués (en abscisses) et l’agrégat de sphères (en ordonnées) est nette avec une faible dispersion. Cela montre l’équivalence des deux simulations EF pour l’estimation des contraintes aux centroides des grains et ce, malgré l’approximation des octaèdres par des sphères, la présence d’interstices entre les sphères et la position des centroides qui n’est pas identique pour les deux agrégats.

Il est à noter toutefois que la correspondance entre les simulations EF et Bretin-EIM serait certainement moins bonne en d’autres points, notamment près de la frontière des grains. En effet, du fait de la répétition de l’agrégat le long des axes X_i ($i \in \{1, 2, 3\}$), les grains extérieurs de l’agrégat ont pour vis-à-vis leurs homologues du côté opposé dans Bretin-EIM, quand ils n’ont que du milieu effectif en face d’eux dans la simulation EF. Si le contraste matériau reste mesuré (le milieu effectif correspondant grossièrement aux propriétés moyennes) et a un effet négligeable aux centroides, rien ne dit que cet effet est toujours négligeable près de la frontière des grains. De plus, près de la frontière des grains, la présence des interstices dans la simulation EF (agrégat de sphères) peut également avoir un impact. Autant de raisons donc qui font que le bon comportement du modèle n’est donc prouvé qu’aux centroides.

3.7 Bilan du chapitre III

En partant des travaux antérieurs de [Vincent et *al.*, 2014] pour les inclusions sphéroïdales *Prolate* isotropes et des fondements de la théorie d'Eshelby, un programme unifié a été développé, capable de traiter des sphéroïdes *Prolates*, Sphériques ou *Oblates*, avec orientation spatiale, et pouvant être isotropes ou anisotropes - le tout dans un milieu infini élastique restant lui isotrope.

Les équations correspondantes, rassemblées au sein d'un module EIM, ont été vérifiées avec succès dans des cas de complexité croissante : cavité non-orientée spatialement, inhomogénéité isotrope spatialement orientée. L'anisotropie a ensuite été introduite, puis combinée avec l'orientation spatiale de l'inhomogénéité - ce pour trois chargements différents. Chaque fonctionnalité ainsi que leur combinaison ont été validées par des comparaisons aux EF tant à l'intérieur qu'à l'extérieur de l'inhomogénéité. Une telle évaluation systématique, n'est pas si courante dans la littérature et permet d'avoir une réelle confiance dans la pertinence des résultats générés par le programme.

Ces confrontations réussies ont été l'occasion d'introduire un formalisme concernant l'application du chargement, la gestion de l'orientation spatiale (à l'aide d'un triplet d'angles d'Euler) et le cadre de l'orientation cristallographique (avec un autre triplet d'angles d'Euler, indépendant du premier) avec notamment les propriétés matériaux associées - à noter que la méthodologie développée est générale et s'accommode de tous les types de symétries matérielles. A noter également que le module EIM gère trois systèmes d'axes et les transferts de l'un à l'autre lorsque l'anisotropie et l'orientation spatiale sont combinées. Enfin, la construction du modèle de référence EF a été détaillée avec les contraintes propres qui y sont attachées, en terme notamment de taille de domaine et de taille d'élément.

En dernière partie, l'intégration du module EIM dans le modèle de Bretin a été abordée. Après un rappel sur le fonctionnement de ce dernier et les limites posées par la présence de la base de données, le principe de fonctionnement du modèle Bretin-EIM a été posé et la fidélité du champ local *aux centroïdes* des grains d'un agrégat de Kelvin par rapport à des simulations de référence EF a été vérifiée avec succès.

Le modèle de Bretin-EIM étant désormais autonome dans son fonctionnement - ce qui était le premier objectif visé dans cette thèse - il est désormais temps de l'adapter à des microstructures plus générales, prélude à l'étude des effets de la morphologie des grains voisins sur le champ local.

Chapitre

4

Vers des microstructures plus complexes

Contents

4.1	Génération de microstructures polycristallines	68
4.1.1	Modèles de Voronoï et de Johnson-Mehl	68
4.1.2	Intégration au sein d'un module de génération	71
4.2	Développement de l'outil GNOME	73
4.2.1	Architecture générale de l'outil GNOME	74
4.2.2	Approximation de la forme des grains	74
4.2.3	Identification des voisins	79
4.3	Sensibilité du GNOME	83
4.3.1	Nombre de grains	83
4.3.2	Influence du Rayon Cadastral	88
4.4	Evaluation par confrontation à des simulations en champs complets	93
4.4.1	Mise en place des simulations	93
4.4.2	Comparaisons GNOME / EF pour 4 grains ciblés au coeur de l'agrégat	94
4.4.3	Comparaisons GNOME / EF pour l'ensemble des grains	97
4.5	Bilan du chapitre IV	103

Un module de calcul EIM a été développé au chapitre 3. Il a prouvé sa capacité à reproduire les variations de contrainte induites par la présence d'une inclusion sphéroïdale de nature différente de son environnement, de forme, rapport de forme, orientation spatiale et éventuellement (si elle est de nature anisotrope) orientation cristalline donnés. Ce module a ensuite été intégré avec succès au sein du modèle de Bretin, remplaçant ainsi la base de données EF et rendant le modèle complètement autonome dans son fonctionnement.

Toutefois, cette nouvelle version du modèle, qualifiée de *Bretin-EIM* reste assez peu réaliste car elle approche la microstructure par une structure de Kelvin, bien trop régulière pour être représentative d'une microstructure réelle. Le présent chapitre a pour objet les développements visant à générer une microstructure moins régulière et la nécessaire adaptation du modèle Bretin-EIM et de son environnement à cette structure par essence irrégulière.

Le présent chapitre va tout d'abord présenter quelques modèles connus de génération de polycristaux (section 4.1) et le module spécifiquement développé ici pour générer les agrégats en entrée du modèle Bretin-EIM. Puis seront abordées les adaptations / enrichissements

de ce dernier afin de traiter ces nouveaux agrégats, avec notamment l'approximation des grains par des sphéroïdes et la manière dont les voisins sont identifiés dans une structure désormais irrégulière (section 4.2).

L'outil de simulation qui en résulte représente une évolution significative par rapport au modèle de Bretin-EIM, du fait de l'ajout des modules de génération d'agrégats (section 4.1), d'approximation de forme des grains (sous-section 4.2.2) ou encore d'identification des voisins de chaque grain (sous-section 4.2.3). Il sera nommé dans la suite de cette thèse GNOME : **G**ÉNÉration de p**O**lycristaux avec **M**orphologie et **E**ffets de voisinage

La sensibilité du GNOME sera alors discutée, d'abord au niveau du nombre de grains à considérer dans les agrégats (section 4.3). L'outil GNOME sera ensuite confronté à des simulations en champs complets afin de mettre en lumière ses atouts mais également ses limites (section 4.4) avant de conclure et d'ouvrir sur les perspectives de développement (section 4.5).

4.1 Génération de microstructures polycristallines

Parmi les modèles de génération de microstructures polycristallines, la tessellation de Voronoï est incontournable notamment parce qu'elle peut être générée par des logiciels dédiés comme Neper [Quey et *al.*, 2011 ; Quey & Renversade, 2018 ; Quey et *al.*, 2018] en plus d'être facilement utilisable pour des calculs en champs complets. Toutefois, cette tessellation possède également des limites, ce qui conduit à se tourner aussi vers d'autres modèles, comme ceux de Laguerre ou de Johnson-Mehl.

4.1.1 Modèles de Voronoï et de Johnson-Mehl

Le modèle de Voronoï¹[Voronoi, 1908a ; Voronoi, 1908b] est très utilisé pour la génération de microstructures. Le domaine (le plus souvent un plan 2D, ou un cube 3D) est découpé en cellules à partir d'un ensemble discret de points : les germes. Chaque cellule comprend un unique germe. L'ensemble des points de l'espace délimité par la cellule sont alors plus proches du germe contenu à l'intérieur que de tous les autres germes.

Dans le cas 2D (figure 4.1a) les frontières entre les cellules sont constituées des médiatrices séparant les germes deux à deux. En 2D, l'algorithme de Fortune a été démontré comme étant le plus efficace en temps de calcul et en espace mémoire [Fortune, 1992]. L'idée générale est de balayer le plan de gauche à droite avec un front pluri-parabolique en "retard" sur la droite de balayage et dont les foyers sont les germes successivement traversés par la droite de balayage.

Dans le cas 3D (figure 4.1b), les frontières entre les cellules sont constituées de plans positionnés à mi-distance entre deux germes et dont les normales sont colinéaires aux droites reliant les germes concernés. La méthode de construction repose souvent sur une triangulation de Delaunay [Delaunay, 1924]. Cette triangulation utilise - dans le cas 3D - un réseau de tétraèdres tel que chaque sphère circonscrite à chacun d'entre eux est vide et ne contient aucun germe. La triangulation de Delaunay étant le graphe dual du diagramme de Voronoï, les germes sont les sommets des tétraèdres de Delaunay tandis que les sommets du diagramme de Voronoï sont les centres des sphères circonscrites.

1. nommé en hommage à Guergui Voronoï (1868-1908) qui a généralisé leur construction à l'ordre n

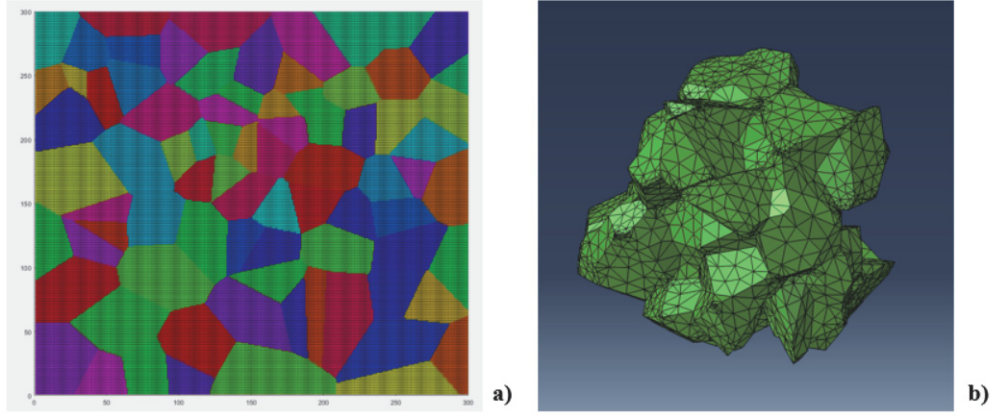


FIGURE 4.1 – Exemples de diagramme de Voronoï 2D (a) et 3D (b)

Après avoir décrit le principe du modèle de Voronoï, l'équation 4.1 en donne la traduction mathématique : Soit $\mathbb{P}^{Voronoi} = [p_1, p_2, \dots, p_n]$ un ensemble fini de n points (les germes) généré au sein d'un domaine $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ (d étant la dimension dans laquelle le diagramme est généré, $d = 3$ ici). La cellule $\mathcal{C}(i)$ est définie par l'ensemble des points $x = (x_1, x_2, x_3)$ les plus proches du germe p_i avec $i \in \{1, \dots, n\}$:

$$\mathcal{C}(i|\mathbb{P}^{Voronoi}, \mathcal{D}) = \{x \in \mathcal{D} | d_V(x, p_i) < d_V(x, p_j), \forall j \neq i\} \quad (4.1)$$

Où :

$$d_V(x, p_i) = \|x - p_i\| \quad (4.2)$$

Une variante fréquente du modèle de Voronoï est le modèle de Laguerre [Lautensack, 2007 ; Lautensack & Zuyev, 2008] (ou Laguerre-Voronoi ou parfois *power diagrams*) où chaque germe se voit attribuer un "poids relatif" r_i afin de traduire le fait que certains germes ont plus d'influence que d'autres. Pour les mosaïques 2D, les germes peuvent être assimilés alors aux barycentres de chaque grain et $r_i = \sqrt{\frac{S_i}{\pi}}$ où S_i est la surface visible d'un grain sur le scan EBSD [Altendorf et al., 2014]. En effet, le modèle de Voronoï a tendance à créer des grains de taille comparable par construction. Aussi, le modèle de Laguerre permet-il de générer des "gros" grains et des "petits" grains (figure 4.2). L'équation de la distance est alors modifiée comme suit :

$$d_L(x, p_i, r_i) = \|x - p_i\|^2 - (r_i)^2 \quad (4.3)$$

Une des conséquences de l'utilisation de frontières planes dans le modèle de Voronoï est le caractère inévitablement convexe et polyédrique des grains ainsi générés, ce qui peut se révéler problématique : en effet, les arêtes vives maximisent les concentrations de contraintes par rapport à la réalité.

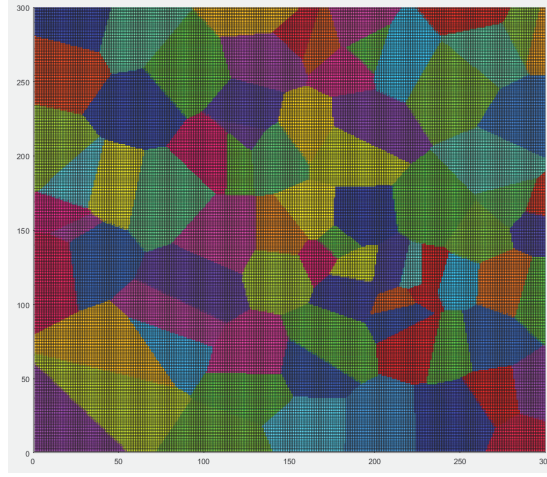


FIGURE 4.2 – Exemple de tessellation de Laguerre 2D

La tessellation de Johnson-Mehl [Johnson & Mehl, 1939], en introduisant des frontières courbes (figure 4.3a), efface cette problématique en même temps qu'elle permet d'interpréter la microstructure résultante comme le résultat d'un processus de croissance isotrope des grains à partir des germes [Lautensack, 2007 ; Altendorf et *al.*, 2014]. La fonction de distance obéit alors à l'équation suivante :

$$d_{\text{JM}}(x, p_i, r_i) = \|x - p_i\| - r_i \quad (4.4)$$

D'après [Altendorf et *al.*, 2014], la tessellation de Johnson-Mehl, en introduisant des courbures, permet de mieux respecter les dimensions des petites cellules. Une conséquence négative par contre, est l'apparition de zones concaves dans les régions les plus grosses, qu'on ne retrouve pas sur les véritables grains (figure 4.3a).

Toutefois si ce modèle est relativement simple à implémenter, il reste adossé à des hypothèses qui limitent le réalisme de la microstructure obtenue. En l'occurrence, la croissance homothétique et homocinétique des cellules crée des grains de morphologies assez régulières et proches d'une forme sphérique et assez semblables d'un grain à l'autre. Un modèle plus évolué, générant une microstructure plus réaliste a donc été développé : le modèle de Johnson-Mehl Anisotrope [Moller & Ghorbani, 2013 ; Altendorf et *al.*, 2014] (figure 4.3b).

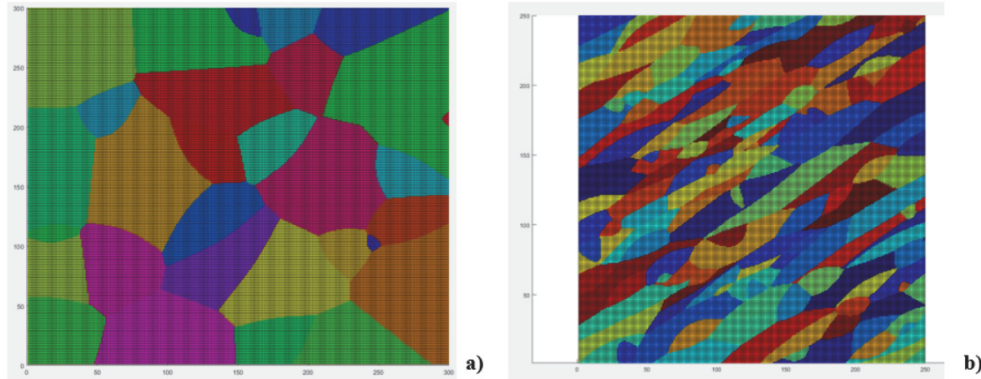


FIGURE 4.3 – Exemple de tessellation de Johnson-Mehl à croissance isotrope (a) et anisotrope (b) des grains

Ce dérivé anisotrope du modèle de Johnson-Mehl peut s'interpréter comme une croissance à vitesse fixe mais différente selon la direction du grain depuis un germe sphérique. L'ensemble des vitesses de croissance forme donc une enveloppe sphéroïdale, dont l'axe de révolution et le rapport de forme peuvent être soit déterminés aléatoirement dans des intervalles fixés au préalable, soit choisis pour obtenir une croissance dirigée et anisotrope de l'ensemble des grains. La fonction distance peut alors s'écrire sous la forme :

$$d_{\text{JMA}}(x, p_i, e_{x,i}, \text{JMA}) = \|x - p_i\| - e_{x,i}, \text{JMA} \quad (4.5)$$

Où $e_{x,i}, \text{JMA}$ est la projection dans la direction x de l'enveloppe sphéroïdale des vitesses de croissance.

Le modèle de Johnson-Mehl Anisotrope peut aussi être interprété comme une croissance à même vitesse dans toutes les directions d'un grain depuis un germe de forme sphéroïdale. Les deux interprétations sont mathématiquement équivalentes. Dans ce cas, les cellules sont alors définies mathématiquement par :

$$\mathcal{C}(i|\mathbb{P}^{\text{JMA}}, \mathcal{D}) = \{x \in \mathcal{D} | d_{\text{JMA}}(x, e_i, \text{JMA}) < d_{\text{JMA}}(x, e_j, \text{JMA}), \forall j \neq i\} \quad (4.6)$$

$d_{\text{JMA}}(x, e_i, \text{JMA})$ représente la distance du point x à l'interface du sphéroïde e_i, JMA centré autour du germe p_i . La forme initiale du germe sphéroïdal définit alors la forme générale du grain et son orientation spatiale.

Les modèles décrits précédemment constituent une liste non-exhaustive de possibilités pour générer des agrégats polycristallins. La façon dont ces modèles sont incorporés au module de génération d'agrégats - lui-même intégré à l'outil GNOME - est traitée dans la section suivante.

4.1.2 Intégration au sein d'un module de génération

Le module de génération d'agrégats, englobé dans l'outil GNOME au même titre que le module EIM, doit être aussi polyvalent que possible. En particulier, il doit être capable de fonctionner avec les différents modèles de tessellation évoqués (Voronoi, Laguerre, Johnson-Mehl Isotrope). De plus, il doit permettre l'utilisation du modèle de Johnson-Mehl Anisotrope dont l'implémentation est un tremplin vers un futur emploi du GNOME pour un milieu macroscopiquement anisotrope. On rappelle en effet que par hypothèse, le milieu effectif dans le cadre de cette thèse sera conservé macroscopiquement isotrope, ce qui exclut une orientation spatiale préférentielle pour la croissance des grains.

Le domaine cubique où l'agrégat est défini est divisé en milliers de voxels dont la densité est choisie par l'utilisateur. En pratique, elle est définie en fonction du nombre de grains afin de conserver une densité de voxels par grain comparable pour les différents agrégats (environ 3300 voxels par grain). Le nombre de voxels par côté du domaine doit être choisi avec soin pour créer des grains "pas trop pixelisés" sans impliquer un temps de calcul trop important.

Les germes des futurs grains sont positionnés *via* un processus de points de Poisson. Lors de la première itération du processus, un unique germe apparaît. Par suite, tous les centroïdes des voxels le voient comme le germe le plus proche et ils appartiennent au même grain. A l'itération suivante, un nouveau germe est révélé. Les centroïdes des voxels plus proches de ce nouveau germe que de l'ancien forment alors un nouveau grain, et ainsi de suite tandis que les germes apparaissent au fur et à mesure.

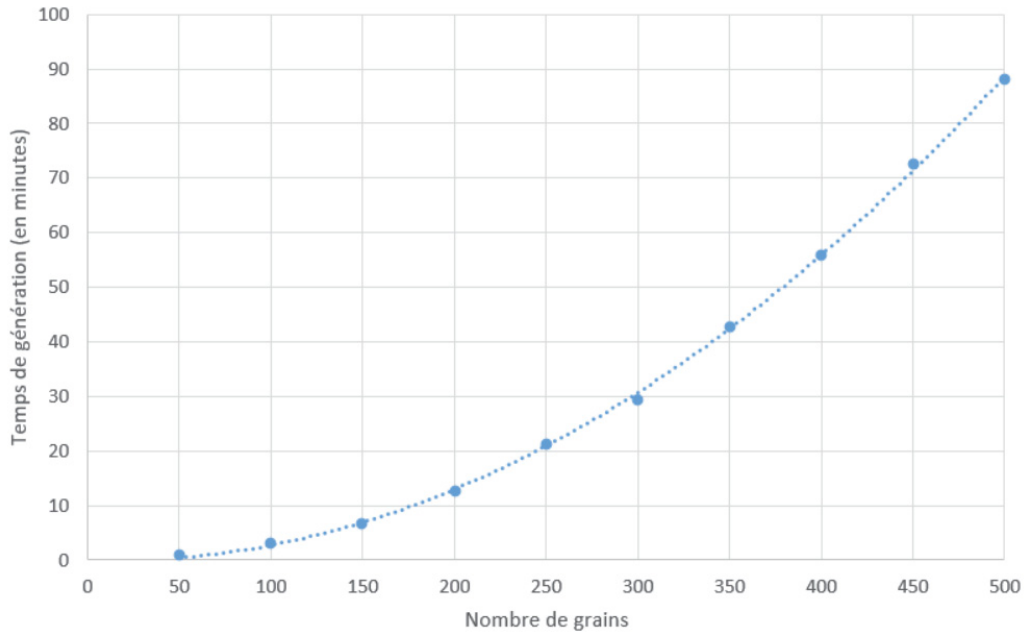


FIGURE 4.4 – Evolution du temps de génération de l'agrégat (en minutes) en fonction du nombre de grains (de densité de voxels constante, environ 3300 voxels par grain) - ordinateur de bureau (12 coeurs, 31 Go de mémoire)

Ce système a l'inconvénient d'être peu optimisé au niveau du temps de calcul (figure 4.4), les n grains impliquant $n!$ calculs de distance pour chaque voxel. Par contre, la fonction calculant les distances entre les germes et les centroïdes de voxels peut être facilement modifiée, permettant de passer d'une tessellation de Voronoï, à une tessellation de Laguerre ou de Johnson-Mehl très simplement. La façon dont la génération d'agrégats est codée dans l'outil est détaillée dans l'algorithme 4.1 ci-dessous.

Note : On remarquera que la tessellation de Johnson-Mehl Anisotrope dans l'algorithme 4.1 ci-dessous ne fait pas appel à des poids relatifs associés aux germes. En effet, la présence de "gros" grains et de "petits" grains est ici obtenue par les rapports de formes qui peuvent être très différents d'un grain à l'autre.


```

1 Algorithme : Module de Génération d'Agrégats
Input : Taille domaine cubique, Nombre de grains (NbG), Nombre de voxels par
        côté du domaine, Type de tessellation*
Output : Tableau des germes, Tableau des centroïdes des voxels avec grain
        d'appartenance**

2 Génération des centroïdes / germes  $p_i$  disposés aléatoirement dans le domaine
  (Processus de Point de Poisson) et stockage des coordonnées
3 Création d'un poids associé à chaque germe ***
4 Division du domaine en voxels

5 for chaque voxel  $Vox_j$  do
6   |  $d_{j, min}$  =taille domaine
7 end for
8 for chaque germe  $p_i$  do
9   | for chaque voxel  $Vox_j$  do
10    | if type tessellation = Voronoï then
11    |   |  $d_{ji}=d_V$ 
12    | else if type tessellation = Laguerre then
13    |   |  $d_{ji}=d_L$ 
14    | else if type tessellation = Johnson-Mehl (isotrope) then
15    |   |  $d_{ji}=d_{JM}$ 
16    | else if type tessellation = Johnson-Mehl (anisotrope) then
17    |   |  $d_{ji}=d_{JMA}$ 
18    |   | if  $d_{ji} < d_{j, min}$  then
19    |   |   |  $Vox_j \in \mathcal{C}_i$ 
20    |   |   |  $d_{j, min} = d_{ji}$ 
21    |   | end if
22    | end for
23   | Identification des voxels, remplissage du tableau des centroïdes des voxels et
     | stockage des coordonnées
24 end for

25 * : SI tessellation de type Johnson-Mehl Anisotrope, alors les données d'entrées
     | suivantes sont également nécessaires : Orientation préférentielle, Excentricité
     | maximale
26 ** : coordonnées données dans le repère global
27 *** : uniquement dans les tessellations de Laguerre et Johnson-Mehl isotrope

```

Algorithme 4.1 : Algorithme décrivant le Module de Génération d'Agrégats

4.2 Développement de l'outil GNOME

Le modèle de Bretin s'est vu adjoindre un Module EIM évitant le recours à une base de données construite par des calculs EF. La méthode de calcul de l'effet individuel de chaque voisin a également été revue. Les agrégats pour lesquels on souhaite réaliser des calculs sont désormais irréguliers. La présente section a pour but d'explicitier les adaptations opérées sur l'outil GNOME pour traiter ce type agrégat, et donc l'évolution entre le modèle de Bretin-EIM et l'outil GNOME.

4.2.1 Architecture générale de l'outil GNOME

L'outil GNOME englobe le module EIM et tout l'environnement lui permettant de fonctionner. Il comporte et fait appel en premier au *module de génération d'agrégats*, détaillé à la section précédente (algorithme 4.1). Une fois les grains créés, il faut les *approcher par des sphéroïdes* en accord avec la version actuellement implémentée de l'EIM dans l'outil. Puis il faut identifier dans la structure de l'agrégat polycristallin, *quels sont les voisins* de chaque grain. Ces deux étapes, détaillées dans les sections suivantes, permettent de traiter le polycristal afin d'en extraire les données nécessaires à l'emploi du module EIM au sein de l'Automate Cellulaire pour *in fine* conduire au champ local. L'architecture générale de l'outil GNOME correspond ainsi à l'algorithme 4.2.

- 1 **Algorithme** : outil GNOME
 - 2 **Input** : Taille agrégat, Nombre de voisins à considérer, Type de chargement
 - 3 **Output** : Tenseur des contraintes/déformations aux points de mesure
 - 4 **Module de Génération d'Agrégat** (sous-section 4.1.2)
 - 5 **Module d'Approximation de forme** (sous-section 4.2.2)
 - 6 **Module d'Identification des voisins** pour chaque grain (sous-section 4.2.3)
- Modèle Bretin-EIM** (chapitre 3)

Algorithme 4.2 : Algorithme général de l'outil GNOME

4.2.2 Approximation de la forme des grains

Une problématique récurrente en mécanique est de parvenir à décrire "simplement" des morphologies 3D pouvant être complexes pour en tirer des conclusions claires sur l'influence que cette morphologie exerce. Ainsi [Billaudeau et *al.*, 2004] s'intéressent à l'influence de la morphologie des défauts sur un critère de fatigue multiaxiale - en l'occurrence, le critère de Murakami. Ils mettent en avant un phénomène de saturation : la morphologie des défauts n'influe sur la limite de fatigue que pour un facteur de concentration de contrainte inférieur ou égal à 2. [Damon et *al.*, 2018] travaillent quant à eux sur l'effet du grenailage sur la morphologie des porosités. Pour décrire des géométries 3D complexes, ils classent les défauts par volume, rapport de forme (ratio des dimensions extrêmes) et sphéricité (ratio du volume et de la surface). L'orientation spatiale des pores par rapport à la normale à la surface est également observée et ils démontrent que le grenailage a pour effet de diminuer cet écart angulaire ce qui diminue le facteur local d'intensité de contrainte.

Enfin [Nadot et *al.*, 2020] veulent évaluer l'influence de la morphologie des défauts sur la limite de fatigue de l'AlSi10Mg fabriqué par SLM (Selective Laser Melting). Pour ce faire, ils utilisent le critère DSG développé par [Vincent et *al.*, 2014] et donc utilisent une approximation sphéroïdale basée sur une équivalence de la matrice d'inertie, calculée pour chaque défaut reconstruit par imagerie 3D. Ils en arrivent à la conclusion que la modélisation du défaut à l'aide d'un sphéroïde *Prolate* est un bon point de départ pour capturer l'effet de la morphologie, mais reste une description encore limitée.

Nous faisons le choix ici de procéder selon le même principe que [Nadot et *al.*, 2020] c'est-à-dire une approximation par le biais de la matrice d'inertie du grain. Toutefois, contrairement aux auteurs précités, nous n'avons pas recours au logiciel Avico et développons notre propre module. L'objectif est ici de préserver au mieux le comportement mécanique de la forme d'origine, le rapport de forme comme l'orientation spatiale du sphéroïde résultant étant directement reliés à la morphologie du grain approché. Le module de génération d'agrégats permet de connaître pour chaque grain les coordonnées des centroïdes des voxels composant le grain. De plus celui-ci est - par nature - constitué du même matériau.

La première étape de l'approximation est donc de construire la matrice d'inertie du grain au niveau de son germe². Cette matrice est exprimée dans le repère global et est notée $I_{z,p}$:

$$[I_{z,p}] = \begin{bmatrix} A & -F & -E \\ -F & B & -D \\ -E & -D & C \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Cette matrice étant symétrique, elle est donc diagonalisable d'après le théorème spectral. Sa forme diagonalisée s'écrit :

$$[I_{z,p}^*] = \begin{bmatrix} \tilde{A} & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{B} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{C} \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Parmi les moments d'inertie \tilde{A} , \tilde{B} et \tilde{C} , il y a un maximum ($I_{z,max}$), un minimum ($I_{z,min}$) et un moment d'inertie médian ($I_{z,med}$).

Soit $[I_{z,e}]$ la matrice d'inertie d'un ellipsoïde quelconque avec a_1 le demi-axe suivant x_1 , a_2 le demi-axe suivant x_2 et a_3 le demi-axe suivant x_3 :

$$[I_{z,e}] = \frac{m}{5} \begin{bmatrix} a_2^2 + a_3^2 & 0 & 0 \\ 0 & a_1^2 + a_3^2 & 0 \\ 0 & 0 & a_1^2 + a_2^2 \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

On pose alors $m = 1$ pour les deux raisons suivantes : d'une part, la masse de chaque grain a déjà été considérée comme unitaire lors du calcul de la matrice d'inertie du grain original (équation (4.7)), d'autre part, le grain étant par hypothèse chimiquement homogène, modifier la masse ne changera rien à la distribution de son inertie.

La matrice $[I_{z,e}]$ est diagonale, de ce fait il est possible d'obtenir un système d'équations reliant les demi-axes aux moments d'inertie. A noter que l'orientation spatiale de cet ellipsoïde est pour l'instant inconnue (elle sera obtenue avec la matrice des vecteurs propres de la diagonalisation, voir plus bas). Toutefois, il s'agit ici de la matrice d'inertie issue d'un ellipsoïde quelconque.

Or, le module EIM dans sa version actuelle utilise des sphéroïdes, qui ont un axe de révolution et donc pour lesquels deux des moments d'inertie sont identiques. Il faut donc réaliser une nouvelle opération d'approximation pour n'avoir plus que deux valeurs différentes pour les moments d'inertie. Il s'agira ici, d'approximer le moment d'inertie médian par le moment d'inertie extrême le plus proche, soit :

$$\begin{aligned} \text{Si : } I_{z,med} > \frac{1}{2}(I_{z,max} + I_{z,min}) \\ \left\{ \begin{array}{l} \longrightarrow \text{ Le sphéroïde est de nature } Prolate \\ \longrightarrow I_{z,med} = I_{z,max} \end{array} \right. \end{aligned} \quad (4.10)$$

2. Au sens strict, cette matrice est censée être exprimée au niveau du centre de gravité. Dans une prochaine évolution de l'outil, il faudrait donc le calculer pour chacun des grains et ajouter la grille des centres de gravités dans le code pour que les coordonnées de ces points soient accessibles dans le module

Sinon :

$$\left\{ \begin{array}{l} \longrightarrow \text{Le sphéroïde est de nature } \textit{Oblate} \\ \longrightarrow I_{z,med} = I_{z,min} \end{array} \right. \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \text{Si : } I_{z,min} &< \frac{1}{2} I_{z,max} \\ &\longrightarrow I_{z,min} = I_{z,med} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Cette dernière équation est nécessaire car donner à $I_{z,med}$ la valeur de $I_{z,min}$ si ce dernier est inférieur à $\frac{1}{2} I_{z,max}$ aboutirait à un demi-petit axe de longueur négative.

Connaissant désormais $I_{z,max}$ et $I_{z,min}$, les deux moments d'inertie du sphéroïde, ainsi que la nature *Prolate* ou *Oblate* de celui-ci, on peut alors en déduire la valeur des demi axes grâce aux équations (4.8) et (4.9) qui se combinent et deviennent alors dans le cas *Prolate* :

$$\begin{bmatrix} \tilde{A} & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{B} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{C} \end{bmatrix} = \frac{1}{5} \begin{bmatrix} 2a_3^2 & 0 & 0 \\ 0 & a_1^2 + a_3^2 & 0 \\ 0 & 0 & a_1^2 + a_3^2 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

puisque par définition pour un *Prolate* : $a_1 > a_2 = a_3$, ce qui amène donc à l'identification suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{A} = I_{z,min} = \frac{2}{5} a_3^2 \\ \tilde{B} = \tilde{C} = I_{z,max} = \frac{1}{5} (a_1^2 + a_3^2) \end{array} \right. \quad (4.14)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_3 = \sqrt{\frac{5}{2} I_{z,min}} \\ a_1 = \sqrt{5 I_{z,max} - a_3^2} \end{array} \right. \quad (4.15)$$

Dans le cas *Oblate*, les équations (4.8) et 4.9 deviennent :

$$\begin{bmatrix} \tilde{A} & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{B} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{C} \end{bmatrix} = \frac{1}{5} \begin{bmatrix} a_1^2 + a_3^2 & 0 & 0 \\ 0 & a_1^2 + a_3^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2a_1^2 \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

puisque par définition pour un *Oblate* : $a_1 = a_2 > a_3$, ce qui amène donc à l'identification suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{A} = \tilde{B} = I_{z,min} = \frac{1}{5} (a_1^2 + a_3^2) \\ \tilde{C} = I_{z,max} = \frac{2}{5} a_1^2 \end{array} \right. \quad (4.17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 = \sqrt{\frac{5}{2} I_{z,max}} \\ a_3 = \sqrt{5 I_{z,min} - a_1^2} \end{array} \right. \quad (4.18)$$

Ces résultats sont résumés dans le tableau 4.19 suivant :

	<i>Prolate</i>	<i>Oblate</i>
a_1	$\sqrt{5I_{z,max} - a_3^2}$	$\sqrt{\frac{5}{2}I_{z,max}}$
a_2	a_3	a_1
a_3	$\sqrt{\frac{5}{2}I_{z,min}}$	$\sqrt{5I_{z,min} - a_1^2}$

(4.19)

Le rapport $\frac{a_1}{a_3}$ correspond au rapport de forme du sphéroïde *inertiellement équivalent*.

Si la morphologie du sphéroïde a pu être déduite de la *valeur* des moments d'inertie du grain d'origine, leur *position dans la matrice d'inertie de ce sphéroïde* ainsi que les vecteurs propres qui leur sont associés vont permettre de connaître l'orientation spatiale du sphéroïde. En effet la matrice des vecteurs propres associés à la diagonalisation est la matrice de passage du repère morphologique du sphéroïde vers le repère global (Annexe C et équation (3.20)). Les angles d'Euler peuvent donc être déduits *via* les équations suivantes :

$$\begin{cases} \theta &= \arccos R_{33}^t \\ \psi &= \arcsin \left(\frac{R_{13}^t}{s_\theta} \right) \\ \varphi &= \arcsin \left(\frac{R_{31}^t}{s_\theta} \right) \end{cases} \quad (4.20)$$

Où R^t est ici la matrice de passage du repère morphologique du sphéroïde vers le repère global, soit la transposée de celle décrite par l'équation (3.20).

Toutefois, l'équation (4.14) pour la forme *Prolate* suppose que $\tilde{A} \leq \tilde{B} = \tilde{C}$, c'est-à-dire que le *Prolate* était "initialement" d'axe de révolution colinéaire à X_1 . De même, l'équation (4.17) pour la forme *Oblate* suppose que $\tilde{A} = \tilde{B} \leq \tilde{C}$, c'est-à-dire que l'*Oblate* était "initialement" d'axe de révolution colinéaire à X_3 ... mais ces inégalités ont été posées sans qu'on connaisse les valeurs de \tilde{A} , \tilde{B} , \tilde{C} . Il faut donc mener une correction sur les angles d'Euler pour que les inégalités sur \tilde{A} , \tilde{B} , \tilde{C} soient bien respectées.

Pour un *Prolate* et d'après l'équation 4.9 (et la partie droite de l'équation 4.13), la ligne i où se situe le moment d'inertie minimal $I_{z,min}$ dans la matrice d'inertie du sphéroïde indique à quel axe global X_i est colinéaire l'axe de révolution "initial" (avant orientation par les angles d'Euler) :

i	correction d'angle :
1	—
2	$\varphi = \varphi - 90^\circ$
3	$\varphi = \varphi + 90^\circ$ $\theta = \theta + 90^\circ$

(4.21)

Pour un *Oblate* et d'après l'équation 4.9 (et la partie droite de l'équation 4.16), la ligne i où se situe le moment d'inertie maximal $I_{z,max}$ dans la matrice d'inertie du sphéroïde indique à quel axe global X_i est colinéaire l'axe de révolution "initial" (avant orientation par les angles d'Euler) :

i	correction d'angle :
1	$\varphi = \varphi + 90^\circ$ $\theta = \theta + 90^\circ$
2	$\theta = \theta - 90^\circ$
3	—

(4.22)

A l'issue de ces opérations, on connaît pour chaque grain - quelque soit sa forme initiale et quelque soit la tessellation utilisée - un sphéroïde "inertiuellement équivalent" avec sa nature (*Prolate* ou *Oblate*), son rapport de forme ($k = \frac{a_1}{a_3}$) et son orientation spatiale ($[\psi \ \theta \ \varphi]$). Enfin, ce sphéroïde partage le même centroïde que le grain original dont il est issu et - par construction - les mêmes directions principales d'inertie.

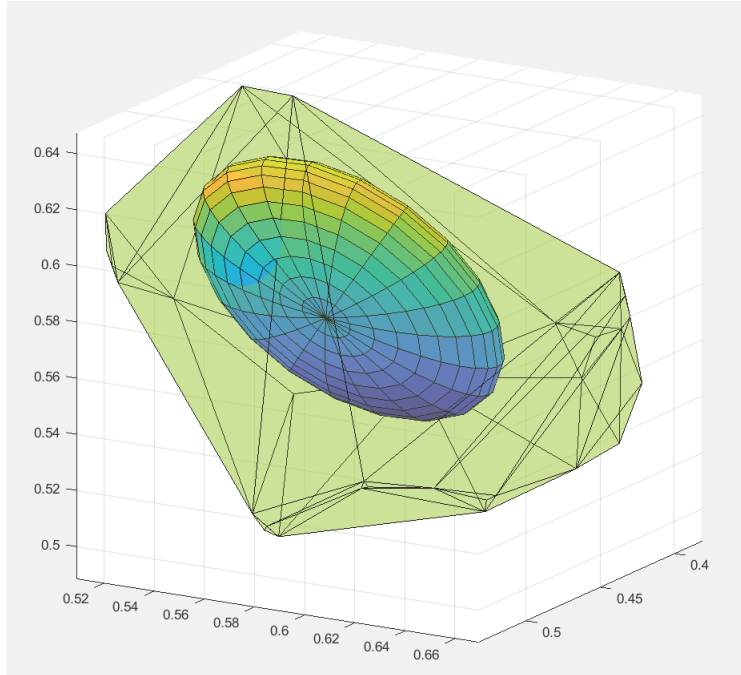


FIGURE 4.5 – Approximation sphéroïdale superposée à la morphologie polyédrique réelle d'un grain issu d'un agrégat de Voronoï

Note : les sphéroïdes équivalents ne sont pas nécessairement contenus intégralement dans l'enveloppe initiale du grain.

Cette première approche est fonctionnelle mais reste toutefois largement critiquable : tout d'abord, l'utilisation de sphéroïdes implique de se cantonner à deux moments d'inertie et fait perdre l'information portée par le moment d'inertie médian original. Or si les trois moments du grain original sont très différents les uns des autres cette perte d'information peut devenir très importante. C'est le cas par exemple des grains qualifiés d'"excentriques" comme celui représenté figure 4.6. Dans une telle situation, le sphéroïde équivalent diffère fortement du grain original.

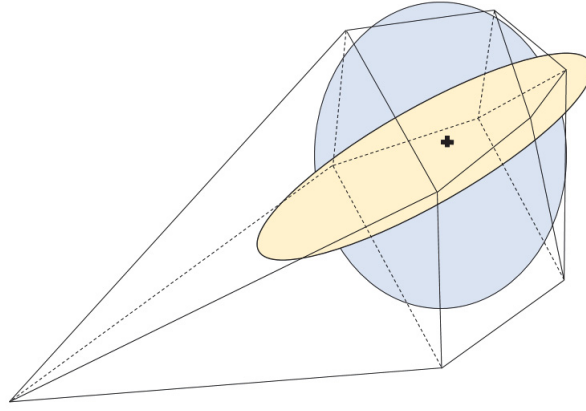


FIGURE 4.6 – Exemple schématique de grain "excentrique" aux moments d'inertie très différents entre eux ; en jaune le *Prolate "inertiellement équivalent"* ; en bleu l'*Oblate "inertiellement équivalent"*

Ces cas de grains "excentriques" correspondent notamment aux grains frontaliers dont la croissance est contrariée par les bords du domaine cubique dans lequel l'agrégat est généré. Une autre limite du modèle actuel est que le grain original et le sphéroïde approché partagent le même centroïde. Or, il suffit que deux germes soient proches l'un de l'autre pour que les grains qu'ils génèrent aient des centroïdes très excentrés par rapport au centre de gravité géométrique. En conséquence, les sphéroïdes approchés sont alors moins pertinents. Positionner les sphéroïdes approchés au niveau des centres de gravité des grains originaux est une perspective de développement à envisager.

La limite posée par l'utilisation de deux moments d'inertie au lieu de trois est liée aux équations programmées dans le module EIM actuel. Une extension du module à des ellipsoïdes quelconques est envisageable (voir chapitre 6). Enfin, on peut questionner la perte d'information liée au passage d'une forme quelconque - aux produits d'inertie potentiellement importants - à un sphéroïde qui par nature possède des produits d'inertie nuls du fait de son axisymétrie et dont la convexité confine les concentrations de contraintes aux zones de très faibles rayons de courbure.

En conclusion, après avoir généré un polycristal par une tessellation quelconque (Voronoi, Laguerre ou Johnson-Mehl), l'outil GNOME est capable d'obtenir un sphéroïde inertiellement équivalent pour chaque grain, condition nécessaire pour l'application du module EIM. L'autre condition - indépendante de la première - est de connaître quels sont les voisins de chaque grain. C'est l'objet de la sous-section suivante.

4.2.3 Identification des voisins

Lorsque l'agrégat était une structure de Kelvin, le nombre et la position relative des voisins étaient identiques pour tous les grains de l'agrégat. Maintenant que cet agrégat est plus général, chaque grain possède un nombre de voisins qui varie d'un grain à l'autre, et ces voisins sont tous à des positions relatives différentes. Cela implique de développer des méthodes permettant d'identifier le voisinage de chaque grain de l'agrégat polycristallin généré numériquement.

Les voisins d'un grain sont repérés dans son environnement proche. Avec cette seule définition, et en l'absence de bords externes morphologiquement périodiques, les grains frontaliers voient beaucoup moins de voisins que les autres grains. Dans la perspective du

développement de conditions aux limites périodiques, il a été choisi de dupliquer l'agrégat pour recréer un environnement complet autour des grains frontaliers et faciliter l'identification d'un voisinage situé tout autour d'eux, comme l'illustre la figure 4.7. L'agrégat est donc reproduit dans les 26 directions 3D autour de l'agrégat originel - ceci uniquement pour permettre l'identification des voisins, *pas* pour les étapes suivantes.

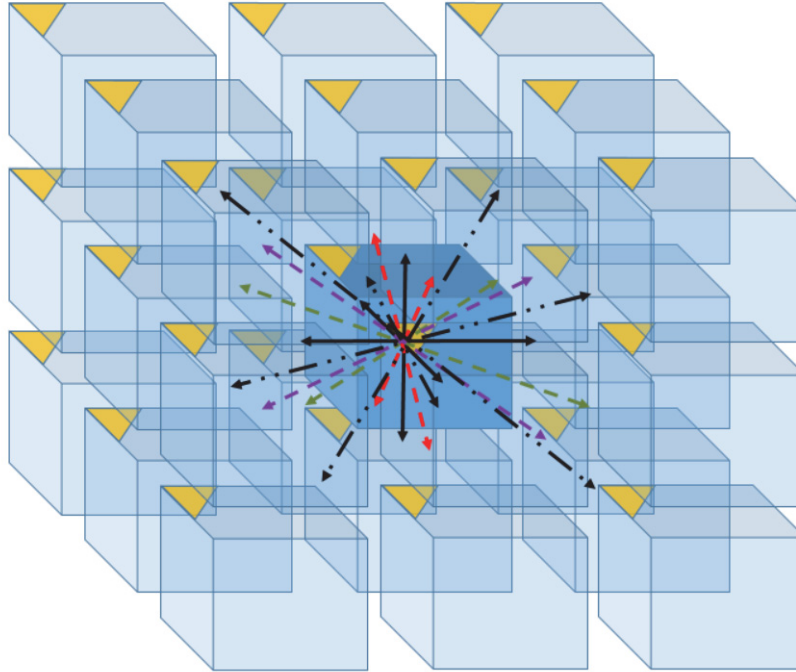


FIGURE 4.7 – Visualisation de l'agrégat originel (en bleu foncé) et du positionnement 3D des 26 copies. En noir et traits pleins, les vecteurs directeurs des 6 copies colinéaires aux axes du repère global. En pointillés verts, (respectivement rouges et violets) les vecteurs directeurs des 12 copies suivant les diagonales des plans $(X_1; X_2)$, (resp. $(X_1; X_3)$ et $(X_2; X_3)$). En noir et traits/doubles points alternés, les vecteurs directeurs des 8 copies suivant les grandes diagonales

Note 1 : Avec cette méthode, les grains frontaliers ont donc autant de voisins que les autres, par contre, pour l'instant ils restent moins pertinents puisqu'au moins une de leurs faces est tronquée par les bords du domaine cubique (section 5.5.2, chapitre 5 par exemple).

Note 2 : Si les caractéristiques des grains dupliqués sont les mêmes, un système de numération et de position spatiale globale est mis en place dans la sur-structure (appelée aussi microstructure étendue) afin d'identifier chaque grain de manière unique, puis l'identifier au grain correspondant dans l'agrégat originel.

La méthode utilisée pour identifier les voisins d'un grain s'inspire des techniques utilisées en urbanisme pour définir le voisinage d'un [cadastre](#) donné [Dahal & Chow, 2014] - lequel peut avoir des formes extrêmement quelconques - et a été nommée de ce fait "méthode du cadastre" (schéma de principe donné figure 4.8). L'idée est de réaliser un agrandissement homothétique de la forme du grain d'intérêt et de considérer comme voisin tout grain dont le centroïde appartient à cette cellule agrandie (en pointillés, figure 4.8).

Il est possible de rendre la méthode plus sévère - et donc de restreindre le nombre de voisins perçus - en considérant un grain comme voisin seulement s'il est entièrement inclus par exemple. Il est aussi possible de rendre la méthode plus souple en considérant comme voisin tout grain au moins partiellement intercepté par la cellule agrandie. Considérer comme voisin un grain dont le centroïde est à l'intérieur de la cellule agrandie est donc un choix en vue d'obtenir une valeur médiane concernant le nombre de voisins obtenus.

Ce choix étant fait, notons \mathcal{R}_c , le facteur d'agrandissement de l'enveloppe du grain d'intérêt. La question est alors de regarder si le centroïde du potentiel voisin est à l'intérieur de cette enveloppe agrandie, ou de regarder si la distance entre les centroïdes du grain d'intérêt et du potentiel voisin, divisée par le facteur \mathcal{R}_c se trouve dans l'enveloppe initiale du grain d'intérêt. Mathématiquement, ce sont des approches équivalentes (figure 4.9), mais le coût de calcul de la deuxième méthode est néanmoins bien moindre (on ne travaille que sur les centroïdes au lieu d'agrandir toute une cellule). Elle a donc été retenue dans le code. Le facteur \mathcal{R}_c est appelé par la suite "*Rayon Cadastral*". Plus ce dernier est grand, plus chaque grain aura de voisins, ce qui aura nécessairement un impact sur le champ local.

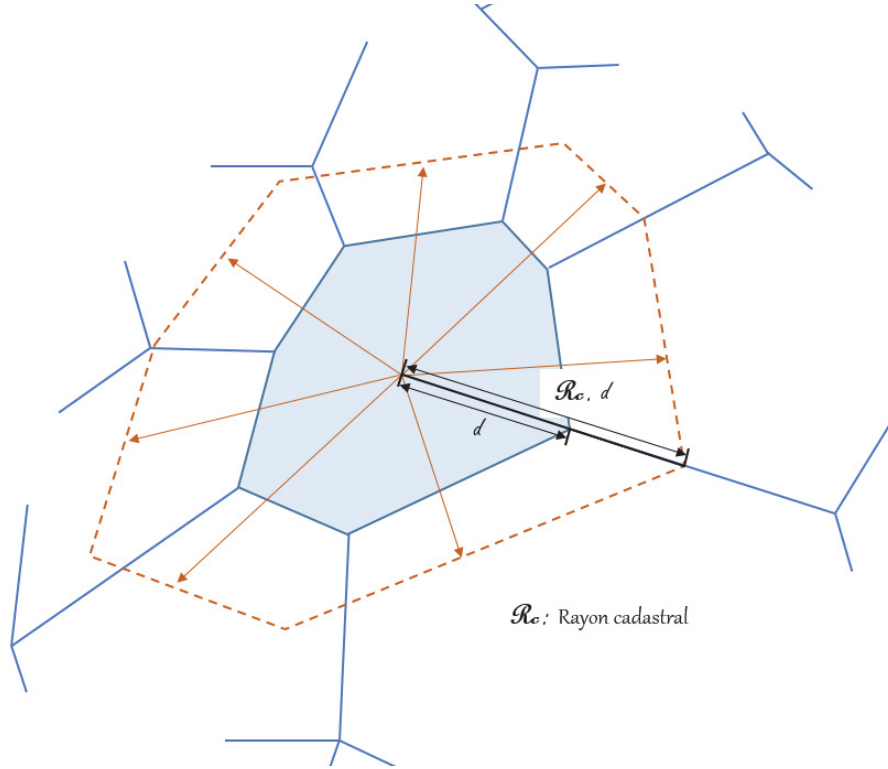


FIGURE 4.8 – Schéma de principe de la méthode du cadastre

On note toutefois que certains grains voisins perçus pour une certaine valeur de \mathcal{R}_c sont situés à une distance intercentroïdes plus faible que des grains voisins détectés plus tôt. Une illustration de cette limite du rayon cadastral est donnée figure 4.9 pour un grain fortement excentrique.

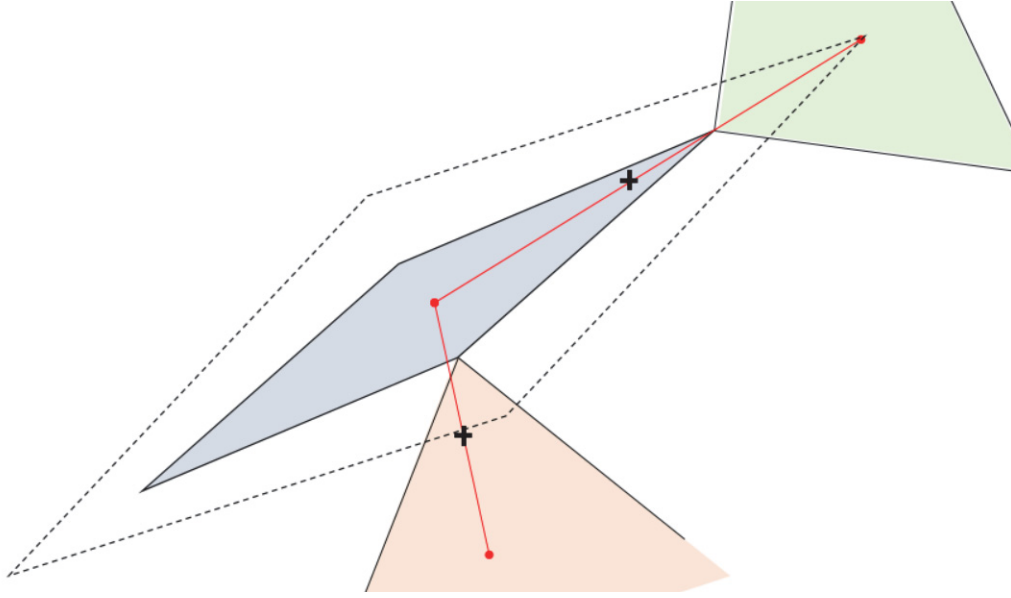


FIGURE 4.9 – Application de la méthode du rayon cadastral à un grain fortement excentrique

Le grain Bleu de la figure 4.9 est considéré comme le grain d'intérêt. Le grain Rose est "plus proche" (du point de vue des distances entre centroïdes) que le grain Vert. Pourtant, lorsqu'on agrandi de manière homothétique le grain Bleu (cellule agrandie en pointillés) ou ce qui revient au même que l'on divise la distance entre centroïdes par le rayon cadastral, on voit que le grain Vert est perçu comme un voisin mais pas le grain Rose. En effet, le centroïde du grain Vert appartient à la cellule agrandie de manière homothétique... ce qui n'est pas le cas du grain Rose, pourtant plus proche.

Ainsi se baser sur une augmentation homothétique du grain (ou une diminution homothétique de la distance) permet de balayer facilement tout l'espace mais possède certaines limitations dès lors que le grain possède une forte excentricité dans une direction donnée. A noter que le problème serait inversé (le grain Rose serait détecté mais pas le grain Vert) si on considérait une sphère de rayon \mathcal{R}_c centrée au centroïde du grain Bleu.

Une solution possible pour pallier aux limites précitées pourrait être le *Balayage Radial de l'Enveloppe* (BRE), également basée sur les travaux de [Dahal & Chow, 2014]. Le principe est le suivant : une droite de longueur \mathcal{R}_c , normale à l'enveloppe initiale du grain d'intérêt et parcourant toute l'enveloppe (avec création d'arcs de cercles aux points saillants) permettrait de détecter les voisins dans l'ordre effectif de leur distance à l'enveloppe même lorsque le grain est fortement excentrique comme l'illustre la figure 4.10. L'implémentation d'une telle méthode est une perspective possible pour la continuation de ces travaux de thèse (chapitre 6).

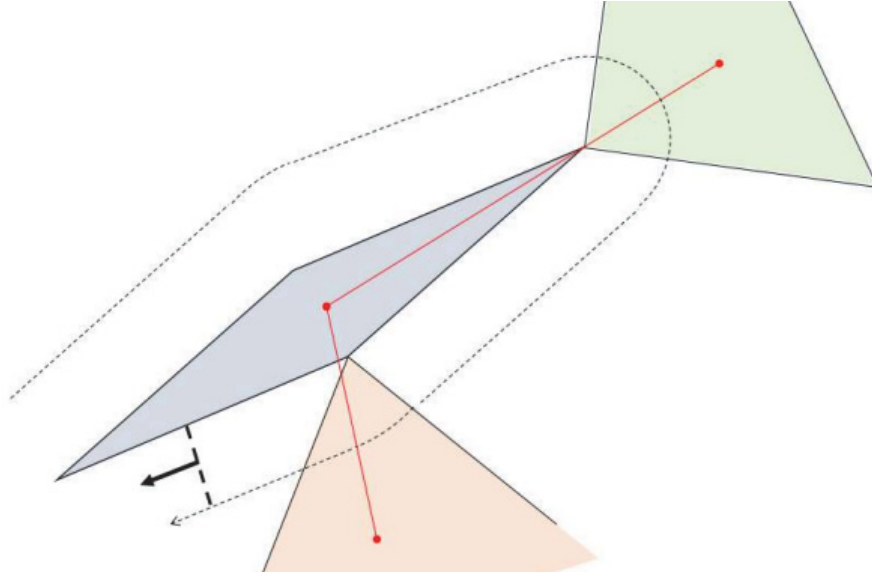


FIGURE 4.10 – Schéma de principe du *Balayage Radial de l'Enveloppe*, appliqué à un grain fortement excentrique

4.3 Sensibilité du GNOME

L'outil GNOME ainsi que ses principaux modules ont été détaillés. Le but de cette section est de discuter de la sensibilité des résultats produits par l'outil GNOME à certains paramètres comme le nombre de grains à considérer dans l'agrégat ou encore le nombre de voisins considérés pour chaque grain, ces deux aspects étant reliés. Les agrégats considérés sont systématiquement composés de 316L dont l'anisotropie élastique est plus forte que celle du Titane, permettant de mieux mettre en lumière les influences des différents paramètres. Les agrégats ont été générés à partir d'une tessellation de Voronoï *via* le module de génération d'agrégats.

4.3.1 Nombre de grains

[Bretin, 2020] utilisait des agrégats de 686 grains pour ses calculs avec l'AC. Il avait montré en s'appuyant sur les travaux de [Barbe, 2001] que ce nombre était suffisant pour assurer une faible variabilité des contraintes aux centroïdes des grains d'une distribution aléatoire d'OC à une autre (avec des octaèdres tronqués). Nous avons fait le choix de considérer 686 grains ici comme notre référence.

L'objectif de cette sous-section est d'une part, d'illustrer l'insensibilisation progressive avec le nombre de grains de la moyenne arithmétique des contraintes sur différentes distributions d'OC, et d'autre part, de vérifier s'il est possible de considérer un agrégat de taille plus faible avec une sensibilité à la distribution d'OC comparable à l'agrégat de référence de 686 grains.

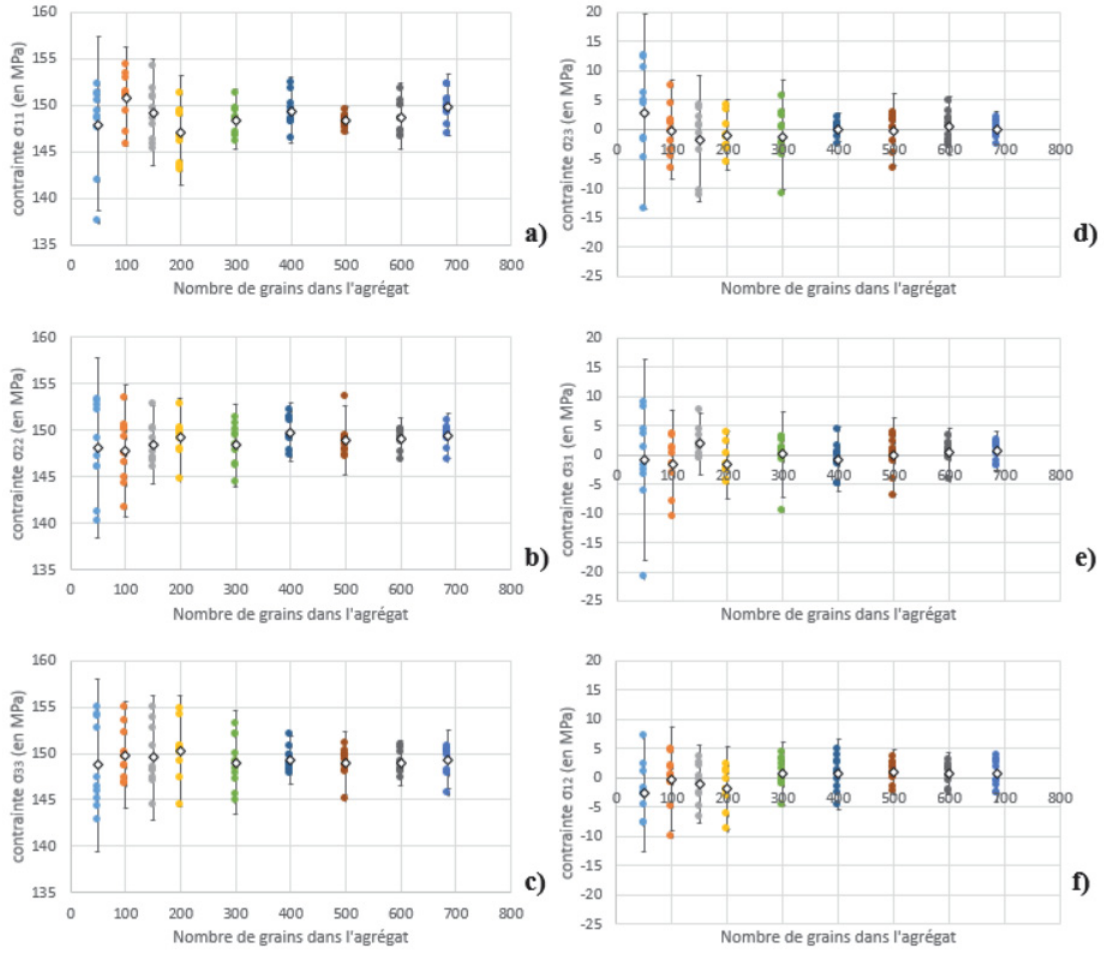


FIGURE 4.11 – moyenne arithmétique des contraintes aux centroides des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$)

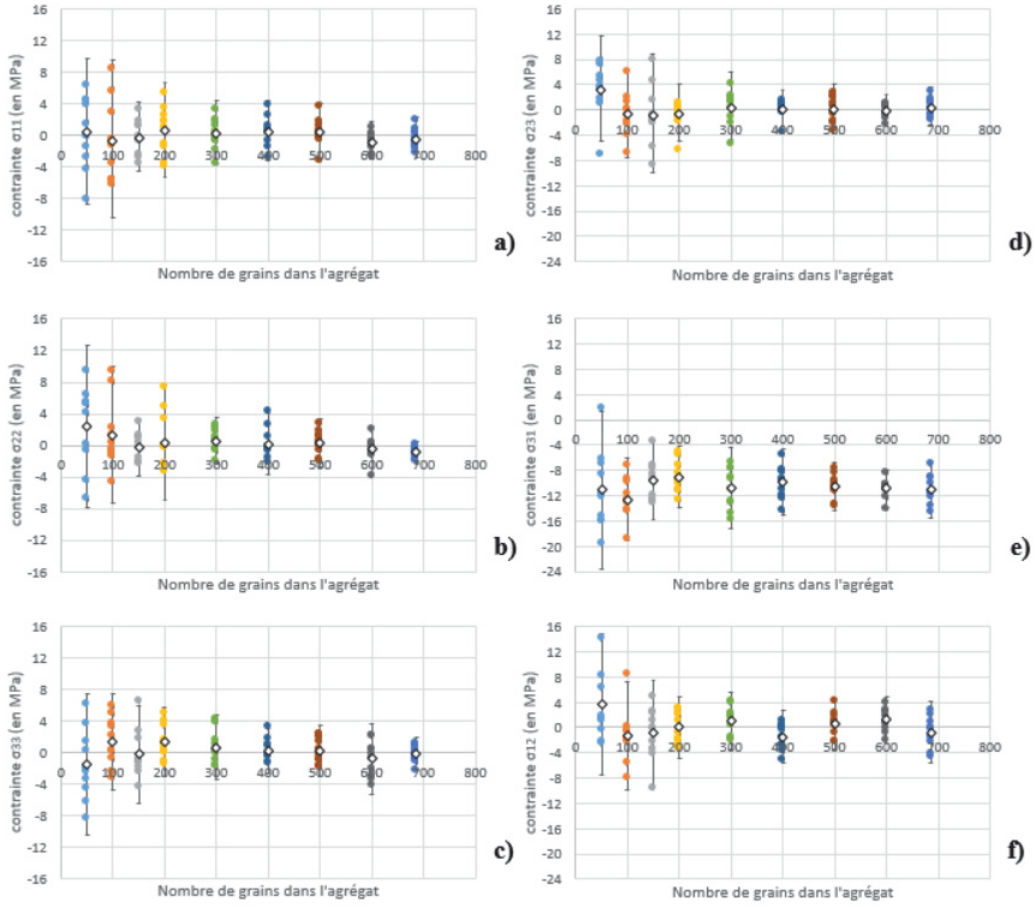


FIGURE 4.12 – moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d’OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l’agrégat pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$)

Des agrégats de 50, 100, 150, 200, 300, 400, 500, 600 et 686 grains ont été générés. Pour chaque agrégat, dix distributions aléatoires d’OC ont été générées. Pour chaque agrégat et chaque distribution, on calcule la moyenne arithmétique $\sigma_{ij, moy}$ de la composante de contrainte σ_{ij} au centroïde des grains. La moyenne arithmétique (losanges blancs) et l’écart-type sur les 10 valeurs de $\sigma_{ij, moy}$ sont calculés. Les résultats pour chacune des 6 composantes du tenseur des contraintes sont présentés figure 4.11 et 4.12 respectivement pour le chargement de déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) et de glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$) et pour un rayon cadastral commun de $\mathcal{R}_c = 2.5$.

Afin d’évaluer l’influence du rayon cadastral (*i.e.* du nombre de voisins considérés) sur la sensibilité des résultats obtenus, la même étude est donc menée à $\mathcal{R}_c = 6$ sur les figures 4.13 et 4.14 respectivement pour le chargement de déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) et de glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$).

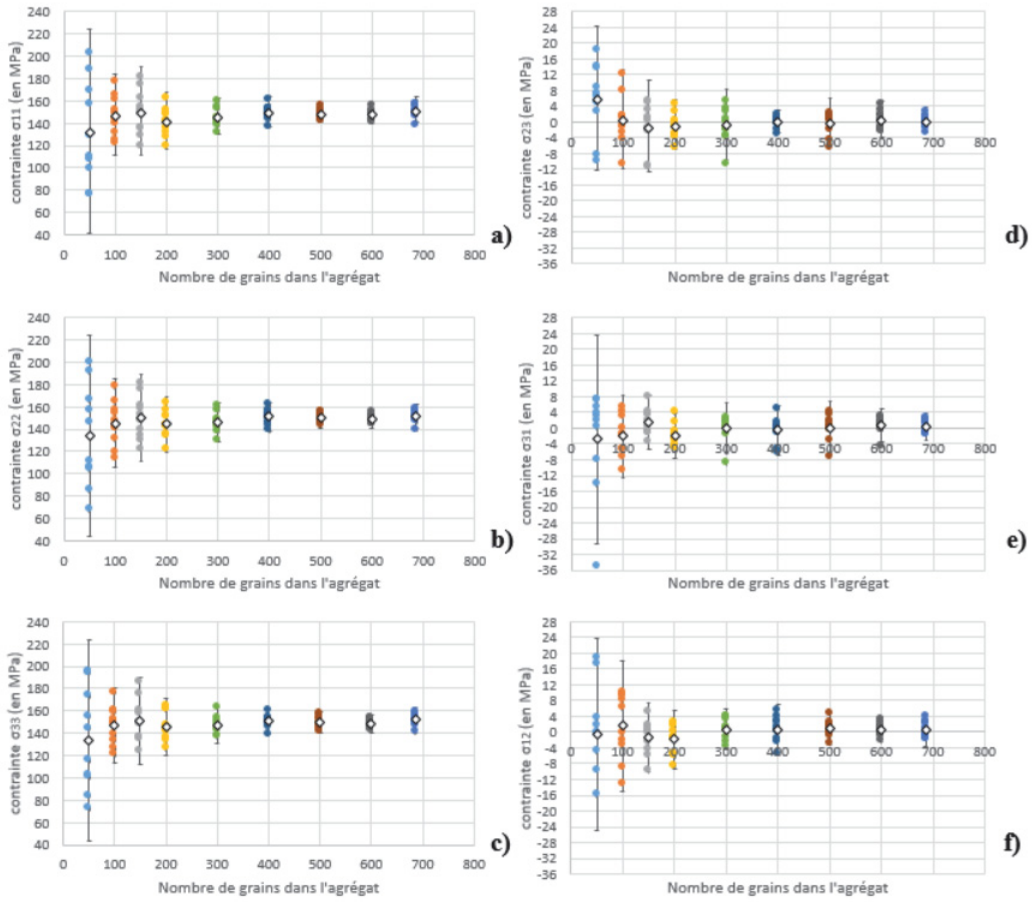


FIGURE 4.13 – moyenne arithmétique des contraintes aux centroides des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 6$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$)

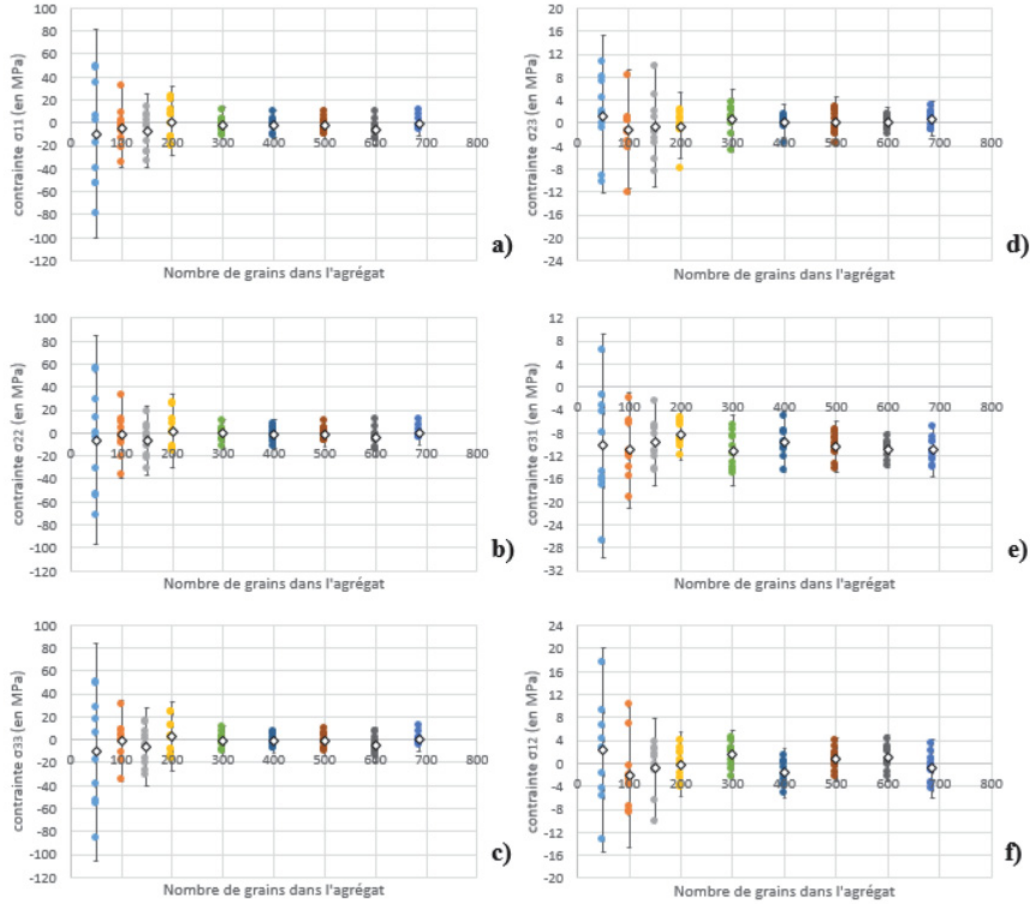


FIGURE 4.14 – moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d’OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l’agrégat pour $\mathcal{R}_c = 6$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$)

Pour la majorité des composantes, la moyenne arithmétique sur les 10 distributions varie faiblement dès que l’agrégat atteint 300/400 grains, même si dans certains cas (figures 4.11b, 4.11c, 4.11e, 4.12a, 4.13d, 4.13e), la fluctuation à 500 grains est encore bien supérieure à celle obtenue à 686 grains. Pour les deux valeurs de \mathcal{R}_c étudiées ici ($\mathcal{R}_c = 2.5$ et $\mathcal{R}_c = 6$) et pour les deux chargements étudiés, un agrégat de 600 grains paraît raisonnable en offrant une sensibilité des résultats à la distribution d’OC à la fois modérée et comparable à celle obtenue avec 686 grains.

Note : Les deux valeurs $\mathcal{R}_c = 2.5$ et $\mathcal{R}_c = 6$ utilisées dans les calculs précédents correspondent aux valeurs minimales et maximales de l’enveloppe des \mathcal{R}_c utilisables pour un agrégat de 600 grains (voir sous-section 4.3.2). De ce fait, $\mathcal{R}_c = 6$ est une borne supérieure adaptée pour les agrégats de 600 grains et plus, mais trop élevée pour les agrégats moins peuplés. Ainsi, une étude plus rigoureuse - que nous n’avons pas eu le temps de conduire ici - devrait d’abord identifier pour chaque taille d’agrégat le \mathcal{R}_c maximum, comme expliqué dans la sous-section suivante pour 600 grains, avant de mener l’étude de sensibilité précédente avec le \mathcal{R}_c maximum propre à chaque taille d’agrégat étudiée.

4.3.2 Influence du Rayon Cadastral

Le nombre de voisins par grain est défini *via* le rayon cadastral \mathcal{R}_c (sous-section 4.2.3). Lorsque ce dernier augmente, l'augmentation homothétique de la cellule (on rappelle ici que le rayon cadastral est ici appliqué sur les distances inter-centroïdes dans l'algorithme) est d'autant plus importante et englobe un nombre plus élevé de voisins. L'étude de l'influence du rayon cadastral a été réalisée sur un agrégat de 316L de 600 grains avec une seule distribution d'OC. L'agrégat a été successivement chargé en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) et en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$).

On commence par étudier le nombre moyen de voisins par grain selon le rayon cadastral choisi et on tentera dans la suite d'analyser les variations de contraintes générées par l'augmentation de \mathcal{R}_c

4.3.2.1 Influence de \mathcal{R}_c sur le nombre de voisins par grain

La figure 4.15 montre l'évolution du nombre moyen de voisins par grain en fonction de la valeur de \mathcal{R}_c . Pour chaque \mathcal{R}_c , les intervalles représentés sont bornés par les valeurs minimales et maximales des voisins obtenues. On notera que ces valeurs extrêmes sont très éloignées de la valeur moyenne. On peut également noter que :

- * Il est inutile de descendre en dessous de $\mathcal{R}_c = 2.5$ car le minimum de voisins relevé est de 3. Or un solide 3D possède au minimum 4 faces et 1 voisin par face. Ici donc, l'augmentation homothétique n'est pas suffisante pour percevoir l'ensemble des cellules contigües.
- * Il est inutile d'aller au-delà de $\mathcal{R}_c = 6$ car le maximum obtenu est de 602 voisins. Pour ce grain possédant 602 voisins, l'augmentation homothétique de la cellule est tellement importante qu'elle détecte plus de voisins que n'en comporte l'agrégat, ce qui signifie que parmi les 602 voisins, il y a plusieurs fois le même grain, détecté une première fois dans l'agrégat, et une seconde fois parmi les duplications de l'agrégat.

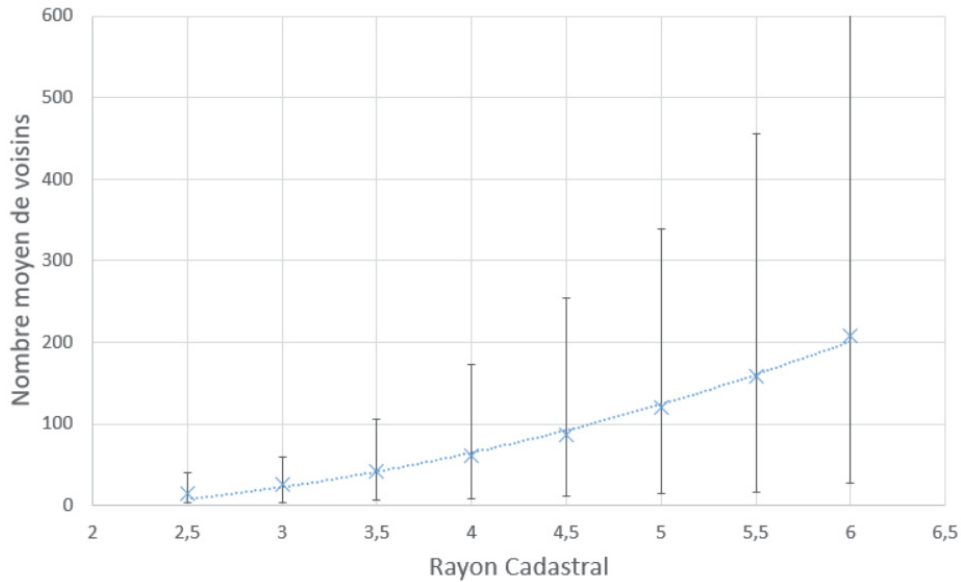


FIGURE 4.15 – Evolution du nombre moyen de voisins avec le rayon cadastral pour un agrégat de 600 grains

L'augmentation du rayon cadastral n'affecte que faiblement les performances de calcul (environ 60 secondes de calcul supplémentaires entre $\mathcal{R}_c = 2.5$ et $\mathcal{R}_c = 6$ ³) comme le montre le graphe 4.16.

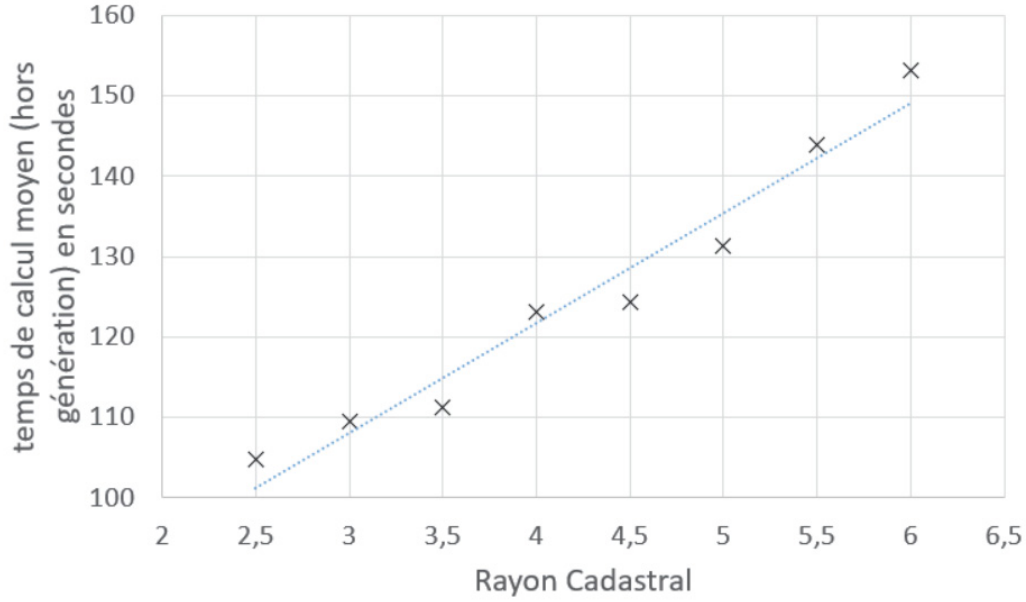


FIGURE 4.16 – Evolution du temps de calcul (hors génération) avec le rayon cadastral pour un agrégat de 600 grains - ordinateur de bureau (12 coeurs, 31 Go de mémoire)

4.3.2.2 Influence de \mathcal{R}_c sur les variations de contraintes

On s'intéresse ici à la proportion de grains dans l'agrégat subissant une variation (augmentation ou diminution) de contrainte de plus de 10% lorsque \mathcal{R}_c passe de 2.5 à 6. Les résultats correspondants sont consignés sur les figures 4.17a et 4.17b pour un chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) et 4.18a et 4.18b pour un chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$). On rappelle que les composantes du tenseur des contraintes sont extraites aux centroïdes des grains, l'outil GNOME ne permettant pas dans sa version actuelle d'aller chercher les valeurs ailleurs.

Les principales observations en déformation uniaxiale sont les suivantes :

- * Les contraintes normales sont en moyenne autour de 150 MPa tandis que les contraintes de cisaillement sont en moyennes nulles. La proportion de grains subissant une **augmentation de plus de 10% de contrainte** (figure 4.17a) est plus importante pour les composantes de cisaillement. Elle est respectivement de 4% des grains à $\mathcal{R}_c = 6$ pour les composantes normales et 24% des grains pour les composantes de cisaillement (respectivement 15% et 35% pour une augmentation relative de plus de 1%), ce qui montre que seule une minorité de grains sont affectés de manière notable par l'augmentation du nombre de voisins, au moins dans ce cas-ci.

3. sachant que à taille d'agrégat fixé, selon la distribution d'orientations cristallographiques, le temps total de calcul (hors génération) peut varier de ± 5 secondes

- * La proportion de grains qui voient une **diminution de contrainte de plus de 10%** en déformation uniaxiale (figure 4.17b) est comparable pour toutes les composantes : elle est d'environ 16% à $R_c = 6$ (25% pour une diminution de plus de 1%).

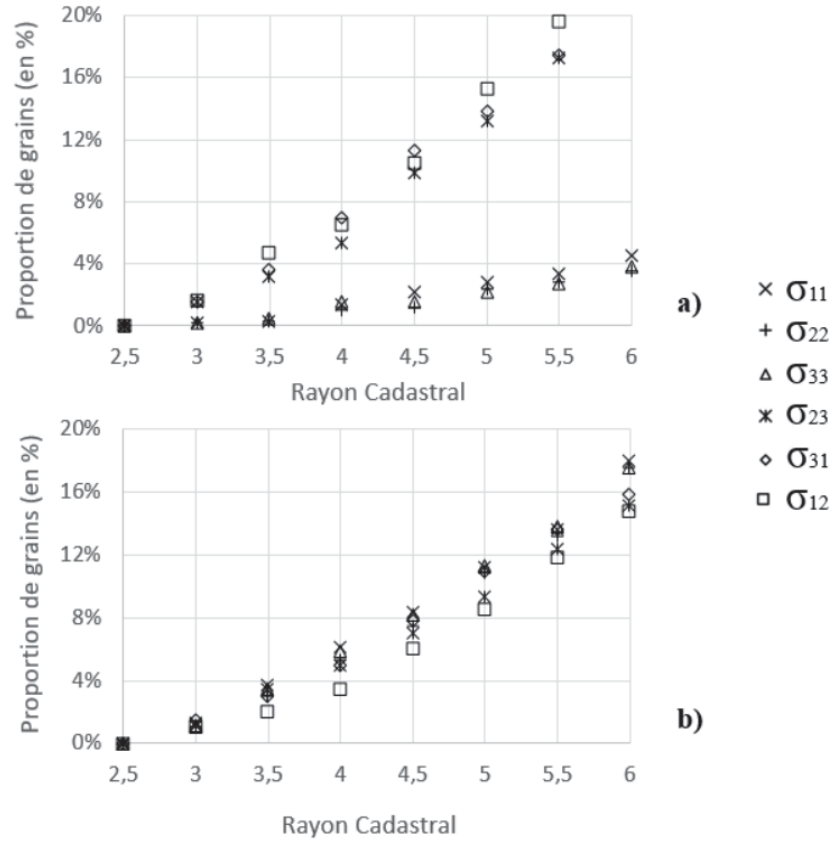


FIGURE 4.17 – Proportion de grains subissant une augmentation de contrainte (a) ou une diminution de contrainte (b) de plus de 10% de la valeur obtenue à $R_c = 2.5$ pour un chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) - agrégat de 600 grains

Les principales observations en glissement simple sont les suivantes :

- * Les composantes de contrainte sont d'ordres de grandeurs similaires et, selon la composante, 17% à 25% des grains voient une **augmentation de plus de 10% par rapport à $R_c = 2.5$** (figure 4.18a) (27% à 34% pour une augmentation relative de plus de 1%).
- * Pour un chargement en glissement simple, la proportion de grains qui subissent une **diminution de la contrainte de plus de 10%** par rapport à la configuration $R_c = 2.5$ (figure 4.18b) va de 15% à 23% selon la composante concernée (25% à 31% pour une diminution de plus de 1%).

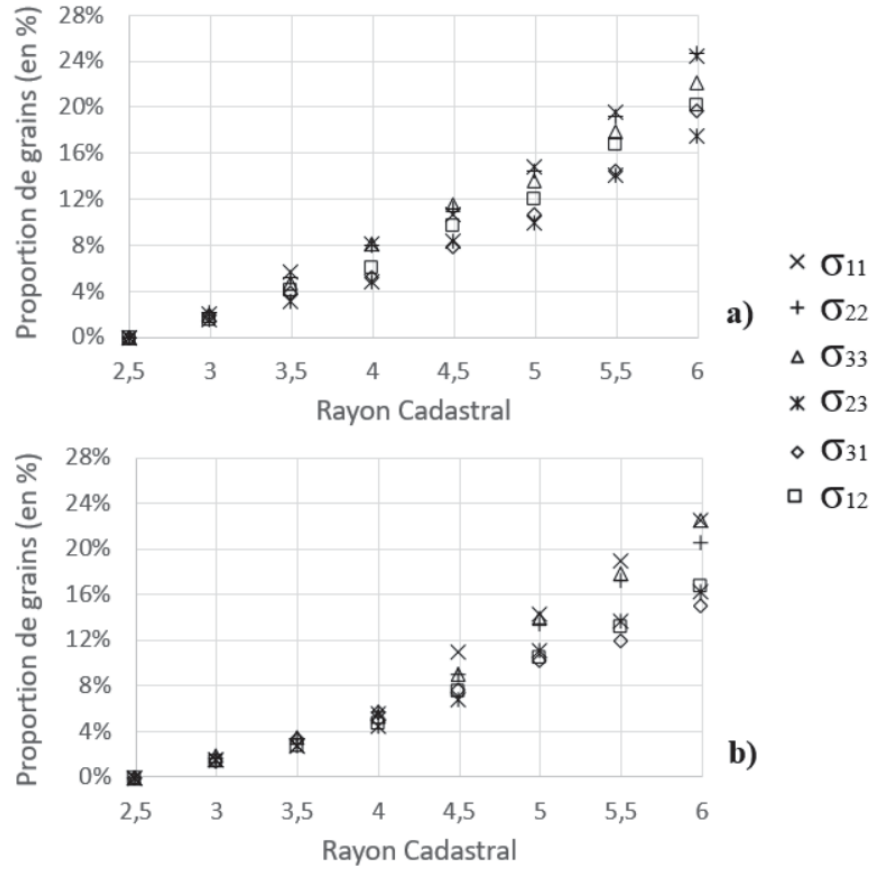


FIGURE 4.18 – Proportion de grains subissant une augmentation de contrainte (a) ou une diminution de contrainte (b) de plus de 10% de la valeur obtenue à $\mathcal{R}_c = 2.5$ pour un chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$) - agrégat de 600 grains

On s'intéresse désormais plus particulièrement aux grains (et leurs voisinages) qui subissent (respectivement causent) une augmentation/diminution de plus de 10% **dès que** $\mathcal{R}_c = 3$ pour au moins une composante du tenseur des contraintes. On notera que ce pourcentage est forcément plus élevé que celui des figures 4.17a, 4.17b, 4.18a et 4.18b car elles montrent des proportions de grains concernés par une variation de 10% pour chaque composante tandis que les chiffres ci-dessous concernent les grains touchés par une variation de 10% toutes composantes confondues.

En déformation uniaxiale, 19 grains (sur 600 soit 3.2%) voient une au moins de leurs composantes de contrainte augmenter de plus de 10% lorsque \mathcal{R}_c passe de 2.5 à 3 et 18 d'entre eux (3%) voient une au moins de leurs composantes de contrainte diminuer de plus de 10%. A noter que certains grains ont des composantes qui augmentent de plus de 10% et d'autres composantes qui diminuent de plus de 10%.

En glissement simple, ce sont respectivement 28 et 23 grains (sur 600, soit respectivement 4.7% et 3.8%) qui voient une au moins de leurs composantes de contrainte augmenter (respectivement diminuer) de plus de 10% par rapport au cas à $\mathcal{R}_c = 2.5$. Les valeurs globalement plus faibles des contraintes, toutes comparables en amplitude entre elles, favorisent une augmentation relative plus importante et donc un plus grand nombre de grains "notablement influencés".

La suite de l'étude va distinguer les deux catégories de grains suivantes :

- Pour un chargement donné, on appellera **grains multi-influencés** les grains dont certaines composantes de contraintes augmentent et d'autres diminuent de plus de 10% lorsque le rayon cadastral passe de 2.5 à 3.
- Pour un chargement donné, on appellera **grains uni-influencés** les grains dont les composantes de contraintes varient de plus de 10% et de la même façon lorsque le rayon cadastral passe de 2.5 à 3.

4.3.2.3 Rôle du nombre de voisins sur les grains les plus influencés

Le nombre de voisins des grains les plus influencés est-il plus important que celui des autres grains dans l'agrégat ?

A $\mathcal{R}_c = 2.5$ ($\mathcal{R}_c = 3$), les grains de l'agrégat ont en moyenne 14.9 (25.9) voisins. Ils "acquièrent" en moyenne 11 voisins (74% d'augmentation) lorsque le rayon cadastral passe de 2.5 à 3.

Pour les grains multi-influencés et uni-influencés en déformation uniaxiale, ainsi que pour les grains multi-influencés en glissement simple, les valeurs atteintes sont clairement supérieures : près de 18 voisins à $\mathcal{R}_c = 2.5$ (contre 14.9), 34 voisins à $\mathcal{R}_c = 3$ (contre 25.9) et une augmentation moyenne de 15-16 voisins supplémentaires (+83 à +92% d'augmentation, contre +11 voisins et +74% d'augmentation en moyenne dans l'agrégat). Il y a donc plus de voisins pour ces grains, pour les deux valeurs de rayon cadastral et ils en "acquièrent" davantage que leurs voisins quand le rayon cadastral augmente.

En revanche, pour les grains uni-influencés en glissement simple, les valeurs sont proches de la moyenne.

De plus dans l'ensemble des cas de figure, il ne semble pas y avoir de voisins spécialement récurrents ou aux caractéristiques extraordinaires.

4.3.2.4 Rôle de la taille relative des grains fortement influencés

Dans ce paragraphe, l'analyse est menée sur les sphéroïdes inertielllement équivalents rattachés à chaque grain. Dans l'agrégat, le rapport de forme moyen est de 1.92 et le volume moyen de 15.59 mm³.

Pour les deux chargements considérés, tant pour les grains multi-influencés que pour les grains uni-influencés, le rapport de forme moyen est compris entre 1.7 et 1.9 mais par contre le volume moyen est lui compris entre 8.5 et 10.5 mm³.

La taille des grains fortement influencés au regard de leurs voisins semble être une cause probable de l'importante variabilité des contraintes. En effet, si leur rapport de forme est comparable à la moyenne, leur volume est en moyenne significativement plus faible que la moyenne de l'agrégat. De ce fait, ces grains ont donc en moyenne des voisins comparativement plus gros, donc plus influents. Ce raisonnement doit toutefois être nuancé car il peut être biaisé par les erreurs d'approximations engendrées par l'approximation sphéroïdale.

4.4 Evaluation par confrontation à des simulations en champs complets

La structure générale de l'outil GNOME et ses principaux modules ont été détaillées. Sa sensibilité aux paramètres-clefs que sont le nombre de grains et le rayon cadastral a été mise en évidence. Il reste à montrer la pertinence des résultats en les comparant aux résultats de simulations en champs complets réalisées dans les mêmes conditions et faisant ici office de référence.

Pour limiter les temps de calculs associés aux simulations en champs complets, on se limitera dans cette section à un agrégat de 110 grains et l'objectif principal sera de comparer la contrainte aux centroïdes de "quelques" grains ciblés, pour un rayon cadastral de plus en plus grand. Ces grains seront pris au centre de l'agrégat pour plus de précision.

Plus le rayon cadastral est grand, plus le nombre de voisins considérés dans l'estimation de l'effet de voisinage par l'outil GNOME est élevé et plus le champ local résultant est fidèle à la réalité. Si tous les voisins sont pris en compte, alors le champ local obtenu devrait correspondre en théorie au résultat EF. En pratique, il y a bien sûr des divergences, que cette section va aborder. Une étude plus globale, où l'attention sera portée sur la corrélation entre les résultats de l'outil GNOME et les résultats EF cette fois sur l'ensemble des 110 grains, sera ensuite proposée. Les comparaisons sur des grains ciblés comme sur l'ensemble des grains seront réalisés sur l'acier 316L et le Titane.

4.4.1 Mise en place des simulations

Une microstructure de type Voronoï de 1000 grains a été générée *via* Neper [Quey et al., 2011] dans un domaine cubique de 1mm de côté. Sur ces 1000 grains, un agrégat central de 110 grains s'est vu attribuer des propriétés et des orientations cristallographiques correspondant au Titane [Simmons & Wang, 1971] puis au 316L [Guilhem, 2011] (section 3.5.1, chapitre 3) et ce pour les deux types de chargement.

Les 890 grains restants se sont vu octroyer les propriétés isotropes du milieu effectif pour les simulations EF et se sont vus attribuer des OC aléatoires et les propriétés de chaque matériau pour les simulations GNOME, la figure 4.15 ayant montré que pour $\mathcal{R}_c = 6$, un grain avait en moyenne bien plus de 109 voisins. L'annexe D rappelle les propriétés de la maille cristalline et du milieu effectif correspondant à chaque matériau.

Comme, parmi l'agrégat central de 110 grains, tous les grains ayant parmi leur voisins un ou plusieurs grains parmi les 890 restants n'ont pas le même voisinage entre les simulations EF et GNOME, on va se focaliser sur quelques grains au centre, pour lesquels le voisinage immédiat est strictement identique entre simulation EF et simulation GNOME.

Les simulations EF ont été réalisées avec le logiciel Abaqus CAE 2017 et utilise la microstructure générée par Neper, ainsi les EF comme l'outil GNOME utilisent strictement le même agrégat. La géométrie et la densité du maillage sont imposés par Neper (maillage type 'Orphan mesh') et le type d'éléments choisi est tétraédrique à interpolation quadratique à 10 noeuds C3D10. Pour une taille caractéristique de domaine cubique à 1mm, le maillage aux bords peut atteindre une taille de 0.05mm, et le maillage dans l'agrégat des 110 grains centraux (qui peut être grossièrement assimilé à une sphère de diamètre 0.6mm) a une taille allant de 0.005mm à 0.05mm. La figure 4.19 fournit des vues du maillage du domaine cubique de 1000 grains, de l'agrégat central de 110 grains et des 4 grains d'intérêt portant les numéros 10, 161, 366 et 410.

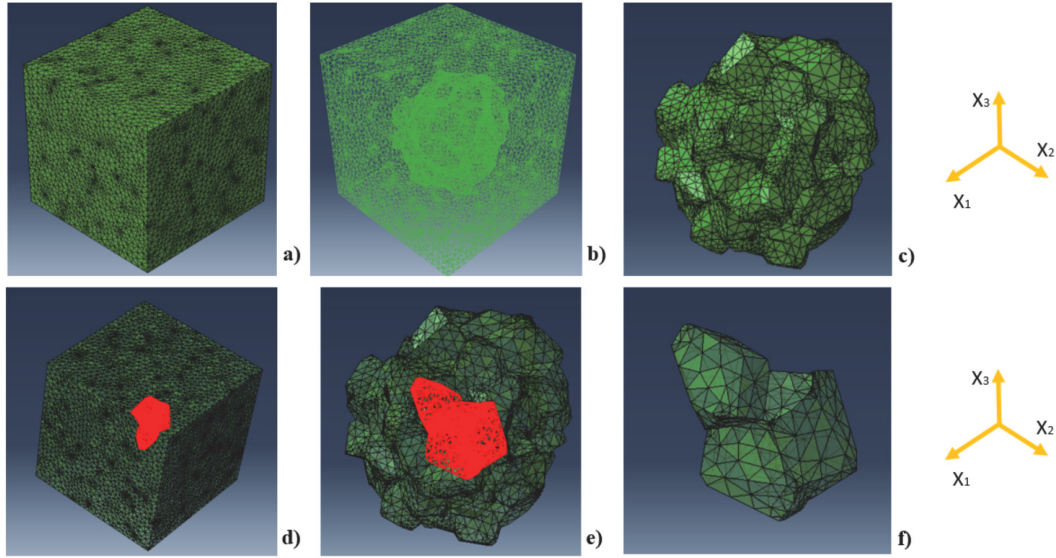


FIGURE 4.19 – Vue isométrique du domaine complet maillé importé sur Abaqus (a) - Vue en transparence du domaine avec mise en évidence de la zone correspondant aux 110 grains centraux (b) - Agrandissement de l'agrégat des 110 grains centraux maillés (c) - Mise en surbrillance rouge des grains 10, 161, 366, 410 dans l'agrégat (d) - Mise en surbrillance rouge des grains 10, 161, 366, 410 au sein des 110 grains centraux (e) - Vue isolée des grains 10, 161, 366, 410 (f)

Les chargements appliqués sont une déformation uniaxiale suivant X_3 , ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) puis un glissement simple dans le plan (X_1, X_2) ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$). Ces chargements ont été considérés pour les deux matériaux. Ils ont été appliqués au domaine cubique de manière identique à celle présentée chapitre 3, sous-section 3.2.1 et section 3.3 (voir notamment la figure 3.6).

Note : Des simulations EF avec conditions limites périodiques ont été tentées mais n'ont pu être exploitées dans le temps imparti à cette partie du travail du fait des repères et notations utilisées par Abaqus qui rendaient compliquée toute comparaison avec les résultats fournis par l'outil GNOME.

4.4.2 Comparaisons GNOME / EF pour 4 grains ciblés au coeur de l'agrégat

La première évaluation porte sur la contrainte de von Mises extraite aux centroïdes des 4 grains situés au coeur de l'agrégat de 110 grains et possédant le même voisinage. Cette comparaison est réalisée pour les deux matériaux, les deux chargements et différents rayons cadastraux. Ainsi, la figure 4.20 présente tout d'abord l'évolution du nombre de voisins de chacun de ces grains avec le rayon cadastral, en comparant cette évolution avec l'enveloppe des valeurs extrêmes et le nombre moyen de voisins pour un agrégat de 600 grains, également polyédriques (voir figure 4.15). On peut ainsi constater que le nombre de voisins associé à ces grains est comparable à la moyenne constatée pour des polyèdres de Voronoï.

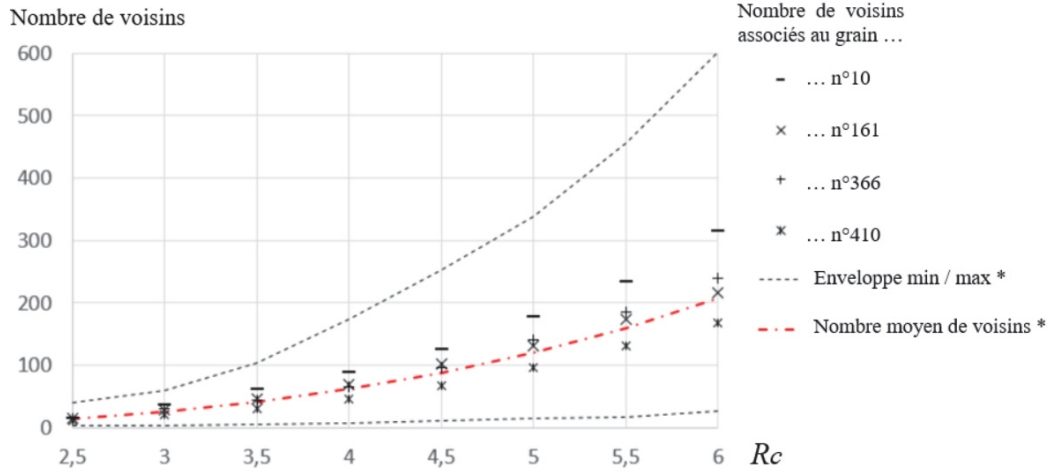


FIGURE 4.20 – Évolution du nombre de voisins associés aux grains n°10, 161, 366 et 410 en fonction du rayon cadastral

* : les courbes en pointillés sont reprises de la figure 4.15 à des fins de comparaisons avec les quantités minimales, moyennes et maximales de voisins à chaque valeur du rayon cadastral pour un agrégat de 600 grains (dont la taille est jugée comme acceptable, voir sous-section 4.3.1).

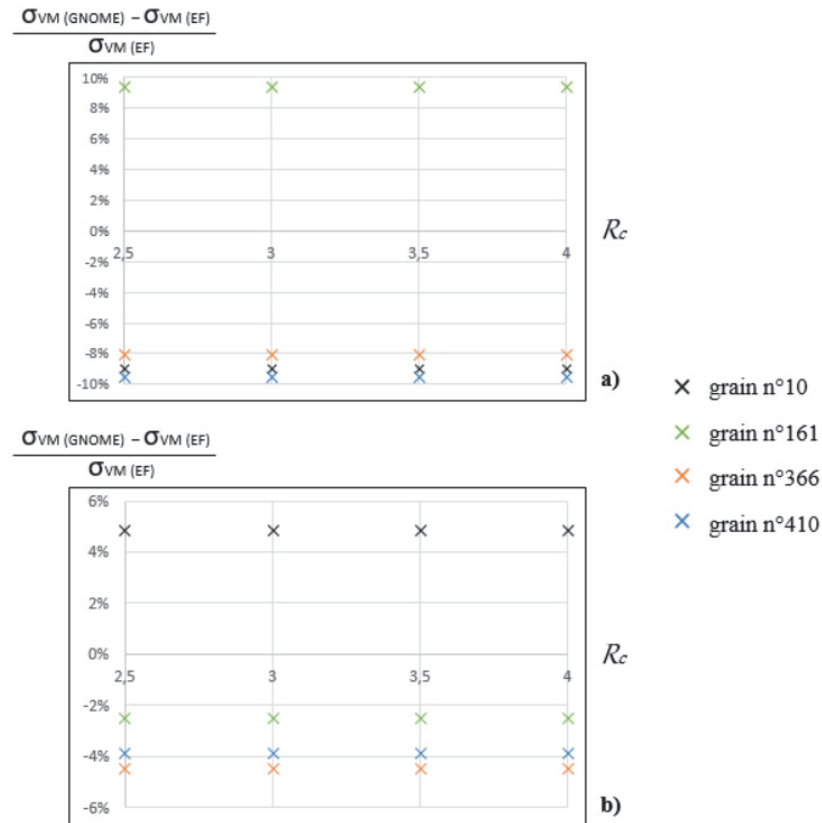


FIGURE 4.21 – Evolution de l'écart relatif entre GNOME et EF sur la contrainte de von Mises aux centroïdes des grains 10 (croix noires), 161 (croix vertes), 366 (croix oranges) et 410 (croix bleues) avec le rayon cadastral. Agrégat de 316L (a) et de Titane (b) chargés en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$)

Par construction, les EF considèrent l'ensemble du domaine pour calculer le champ local. Pour l'outil GNOME, lorsque le rayon cadastral augmente, on considère de plus en plus de voisins et donc l'effet de voisinage devrait être de plus en plus proche de celui pris en compte par les EF. Toutefois, pour les 4 grains centraux, au delà de 109 voisins, le voisinage va prendre en compte des grains ayant des propriétés différentes selon la simulation (propriétés effectives isotropes pour la simulation EF, OC et propriétés cristallographiques pour la simulation GNOME). D'après les résultats de la figure 4.20, il faut donc s'arrêter à $\mathcal{R}_c = 4$ pour éviter ce cas de figure. Les figures 4.21 ci-dessus et 4.22 ci-dessous montrent ainsi l'évolution de l'écart relatif entre la contrainte de von Mises donnée par l'outil GNOME et la valeur EF, lorsqu'on prend en compte de plus en plus de voisins dans l'effet de voisinage (*i.e.* que le rayon cadastral augmente).

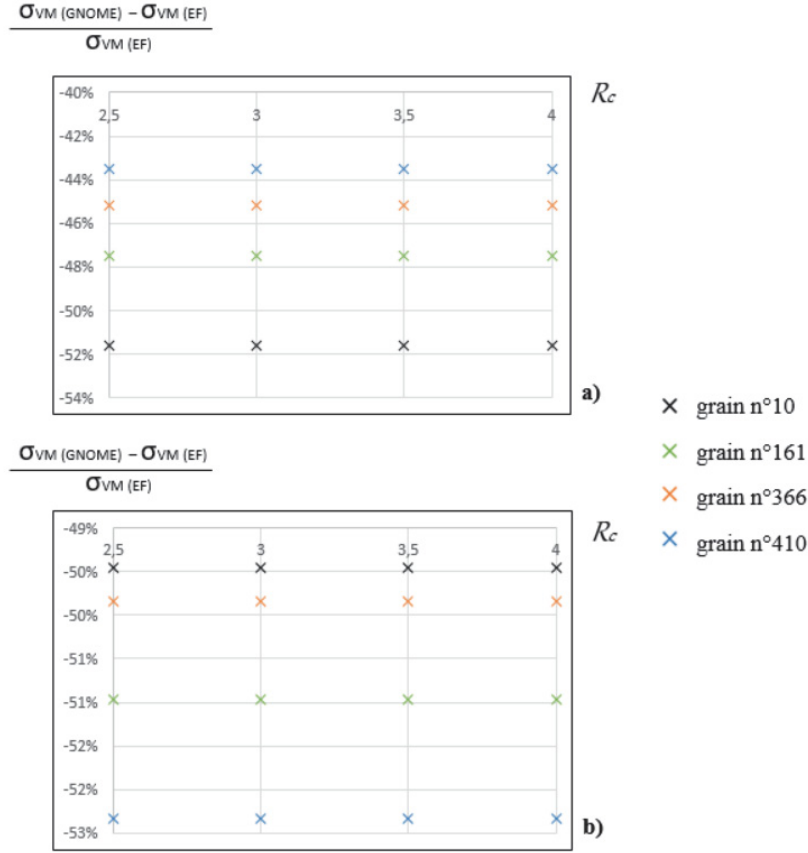


FIGURE 4.22 – Evolution de l'écart relatif entre GNOME et EF sur la contrainte de von Mises aux centroïdes des grains 10 (croix noires), 161 (croix vertes), 366 (croix oranges) et 410 (croix bleues) avec le rayon cadastral. Agrégat de 316L (a) et de Titane (b) chargés en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$)

Sur les figures 4.21a et 4.21b, on pourra noter le faible écart relatif entre les prédictions GNOME et les simulations EF dans le cas du chargement de déformation uniaxiale. Les écarts relatifs obtenus en glissement simple sont eux par contre, importants.

Contrairement à ce que nous avons supposé, il apparaît clairement que la diminution de l'erreur est négligeable lorsque le rayon cadastral augmente, ceci sur les 4 grains et les deux conditions de chargement et de matériau. Ce résultat semble indiquer que les voisins adjacents à ces 4 grains sont de loin les plus influents et les voisins plus lointains semblent avoir une influence qui est soit marginale, soit se neutralise d'elle-même. La sous-section 4.3.2, montre que des grains peuvent voir leur état de contrainte varier de manière notable lorsque le rayon cadastral augmente, mais également que certaines des composantes de leur tenseur des contraintes peuvent évoluer en opposition créant au sein du voisinage d'un grain des mécanismes de compensation. Enfin, il faut noter que ce type d'observation se retrouvera dans la sous-section 5.4.3 du chapitre 5. Le temps a manqué pour en approfondir les causes, mais il s'agira d'une perspective d'étude importante. En plus des mécanismes de compensation précités, on peut tout de même avancer quelques autres causes possibles :

- Le tenseur des contraintes n'est obtenu qu'au centroïde du grain et donc est insensible aux variations du champ local générées par le voisinage dans le reste du grain. L'effet d'un plus grand nombre de voisins est - peut-être - davantage perçu en périphérie du grain qu'au centroïde de celui-ci.
- L'utilisation d'un milieu effectif "idéalisé" dans les calculs - au détriment des caractéristiques effectives "réelles" de l'agrégat - a pu biaiser en partie les résultats. Le calcul de ce milieu effectif "réel" fait d'ailleurs partie des perspectives les plus immédiates de cette thèse (chapitre 6)*.

* : les EF utilisent aussi un milieu effectif idéalisé, mais pas de la même manière. En effet, dans la simulation EF, il n'est présent qu'autour de l'agrégat central de 110 grains. Dans la simulation GNOME, il intervient dans le calcul de la déformation de chaque grain puisqu'il s'agit du milieu de référence (voir sous-sections 2.2.3.1, 2.3.3 du chapitre 2 et sous-sections 3.1.1, 3.5.2 et 3.6.2 du chapitre 3).

4.4.3 Comparaisons GNOME / EF pour l'ensemble des grains

La seconde évaluation réalisée porte sur toutes les composantes du tenseur des contraintes, extraites aux centroïdes des 110 grains de l'agrégat central. Cette comparaison est réalisée pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. pour les deux matériaux et deux chargements.

Après approximation par des sphéroïdes, l'agrégat des 110 grains comporte 29 *Oblates*, soit une proportion de 26.4% (proportion qui est d'ailleurs peu variable d'un agrégat à l'autre, voir section 5.3, chapitre 5). La distribution des rapports de forme provenant des sphéroïdes inertiuellement équivalents suit une loi normale pour les 110 grains composant l'agrégat central. Il en est de même si on considère uniquement l'une ou l'autre forme (voir figure 4.23). Les moyennes et écart-types associés sont de (2.00 ± 0.79) pour les 110 sphéroïdes pris ensembles (points noirs), (1.79 ± 0.30) pour les formes *Prolates* considérées isolément (73.6% de l'effectif total, points bleus) et (2.56 ± 1.32) pour les *Oblates* pris seuls (26.4% de l'effectif total, points rouges figure 4.23). Ces derniers ont donc une acuité géométrique et une dispersion de rapports de forme bien plus prononcées que les *Prolates*.

Fréquence d'apparition

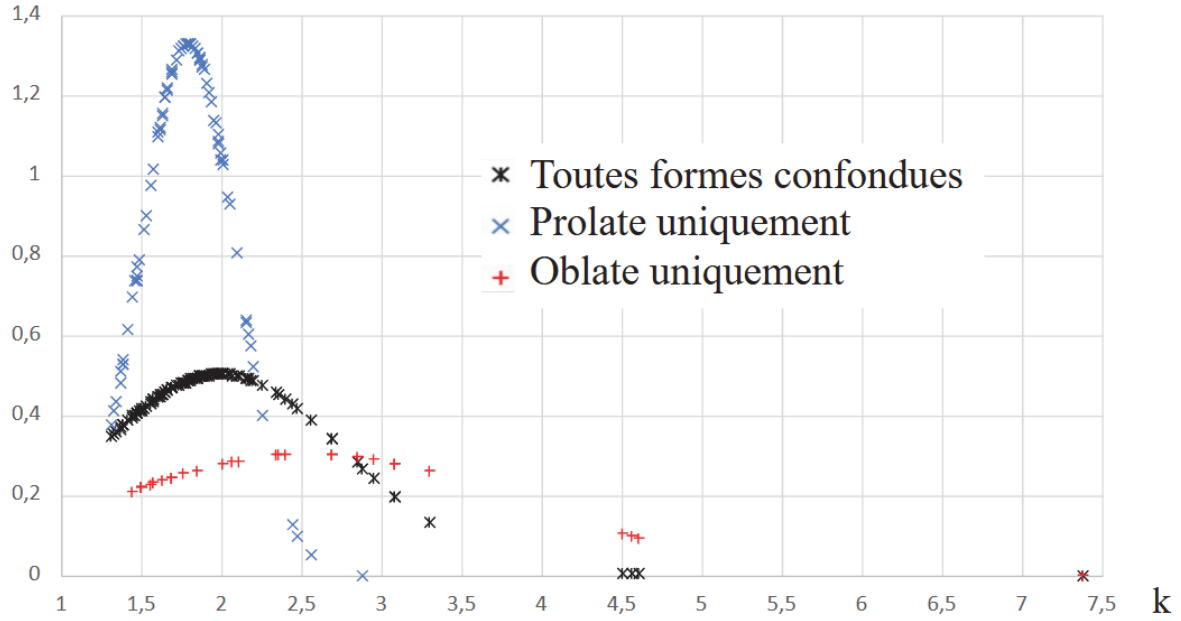


FIGURE 4.23 – Distribution des rapports de forme des sphéroïdes inertielllement équivalents, toutes formes confondues (en noir), *Prolates* uniquement (en bleu) et *Oblates* uniquement (en rouge) - Agrégat de 110 grains

Les figures 4.24, 4.25, 4.26 et 4.27 montrent les résultats de comparaison pour le Titane. La corrélation entre les prédictions de l'outil GNOME et les calculs de référence EF est bonne et avec une faible dispersion, quelque soit la composante du tenseur des contraintes considérée ou le chargement externe appliqué.

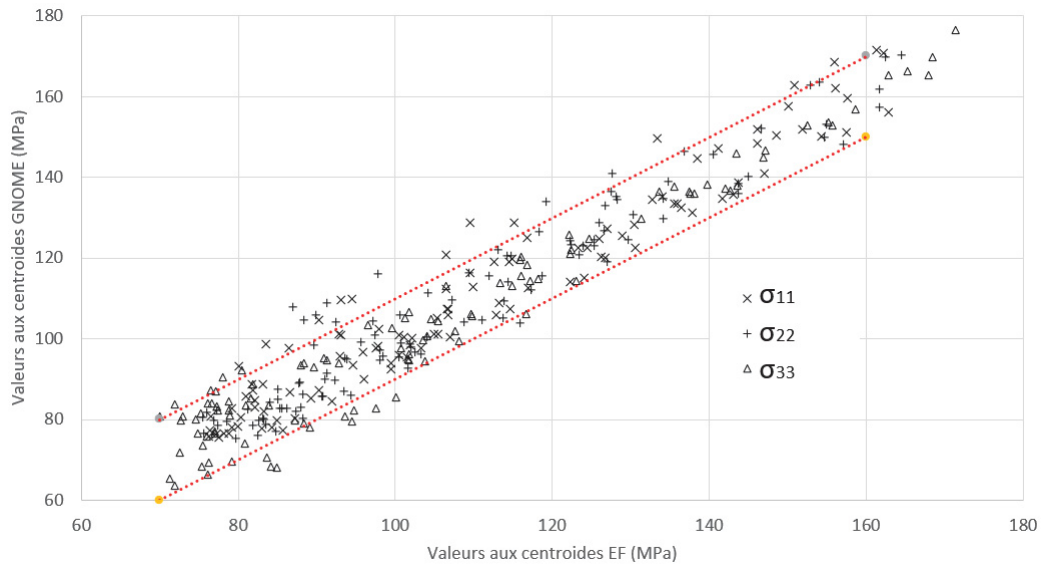


FIGURE 4.24 – Agrégat de 110 grains, Titane α - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en déformation uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ - contraintes normales avec barres d'erreurs à ± 10 MPa

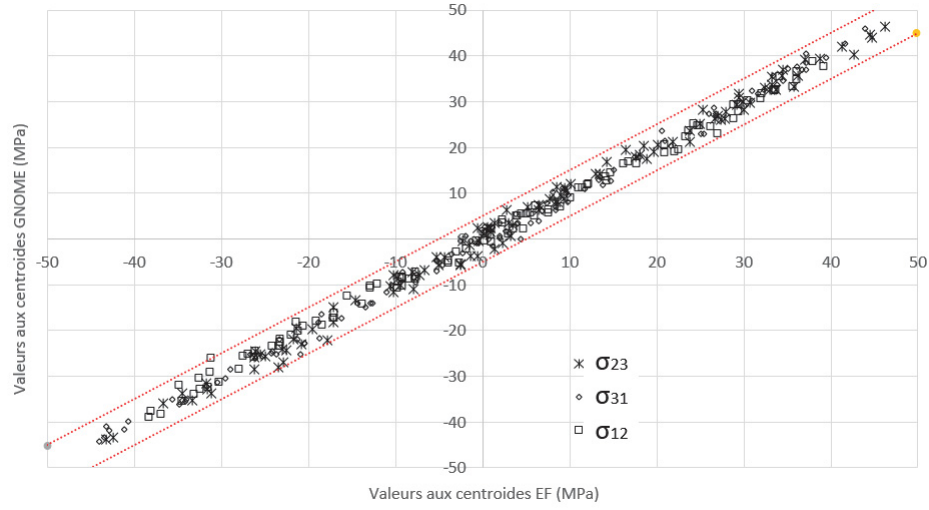


FIGURE 4.25 – Agrégat de 110 grains, Titane α - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en déformation uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ - contraintes de cisaillement avec barres d'erreurs à ± 5 MPa

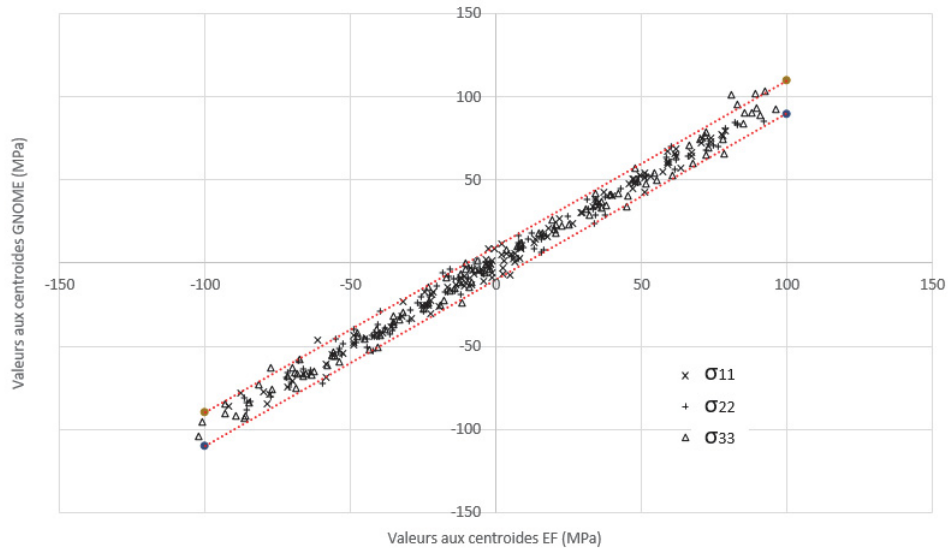


FIGURE 4.26 – Agrégat de 110 grains, Titane α - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en glissement simple, tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ - contraintes normales avec barres d'erreurs à ± 10 MPa

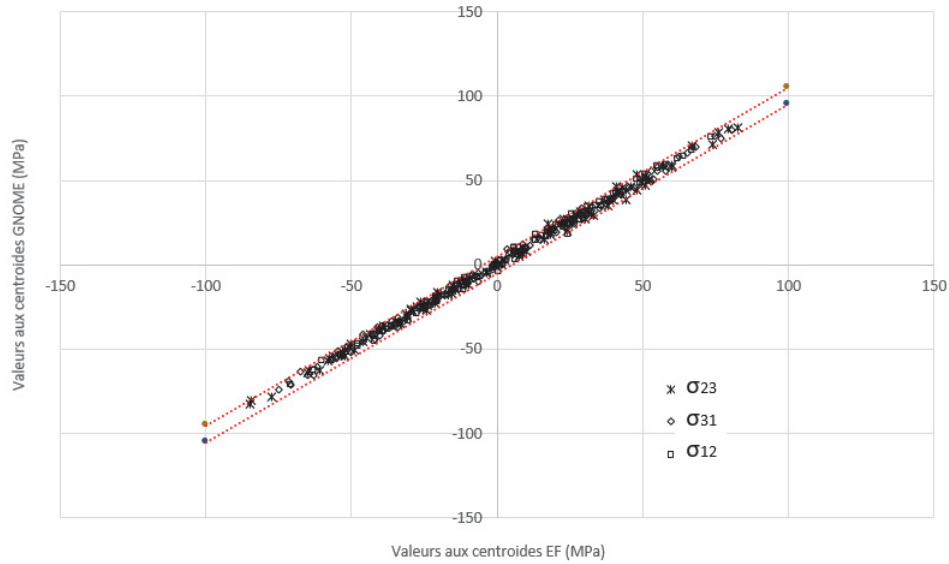


FIGURE 4.27 – Agrégat de 110 grains, Titane α - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en glissement simple, tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ - contraintes de cisaillement avec barres d'erreurs à ± 5 MPa

Les écarts absolus maximums relevés sont de 21.1 MPa pour les composantes normales (5.26 MPa pour les composantes de cisaillement) en déformation uniaxiale et de 20 MPa pour les composantes normales (resp. 6.4 MPa) en glissement simple.

Par principe, la même confrontation au niveau global a été tentée entre prédictions GNOME et simulations EF pour l'acier 316L. Les résultats sont visibles sur les figures 4.28, 4.29, 4.30 et 4.31, avec toujours une forte corrélation mais une dispersion bien plus élevée - probablement surtout due à l'anisotropie élastique plus importante de la maille de 316L.

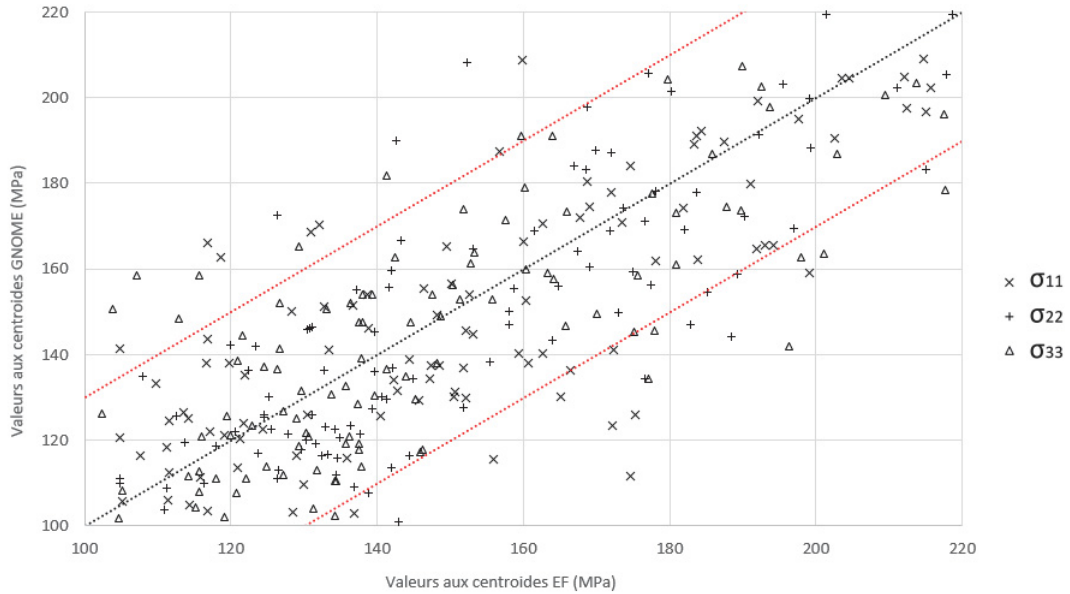


FIGURE 4.28 – Agrégat de 110 grains, 316L - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en déformation uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ - contraintes normales avec barres d'erreurs à ± 30 MPa

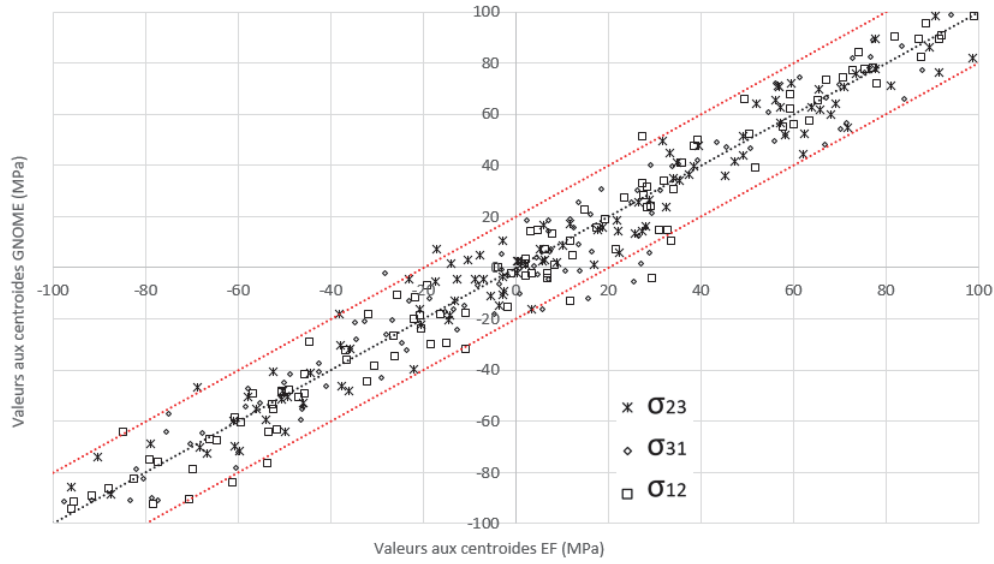


FIGURE 4.29 – Agrégat de 110 grains, 316L - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en déformation uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ - contraintes de cisaillement avec barres d'erreurs à ± 20 MPa

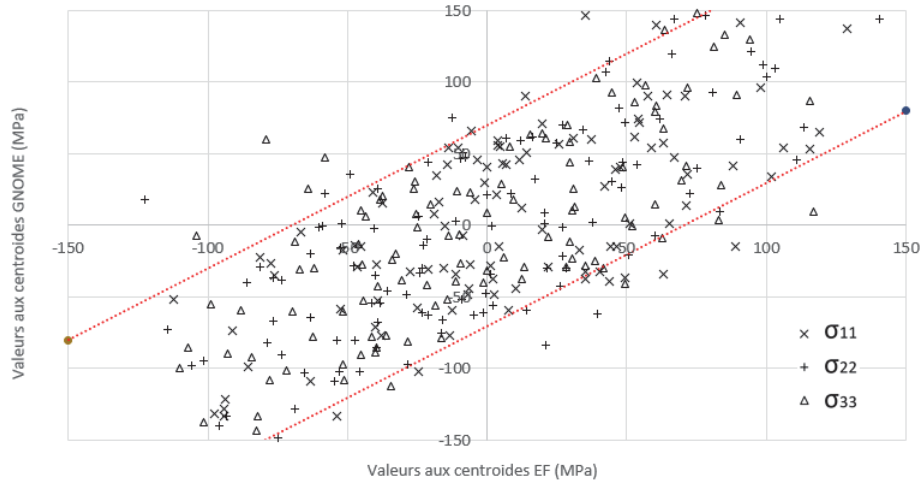


FIGURE 4.30 – Agrégat de 110 grains, 316L - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en glissement simple, tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ - contraintes normales avec barres d'erreurs à ± 70 MPa

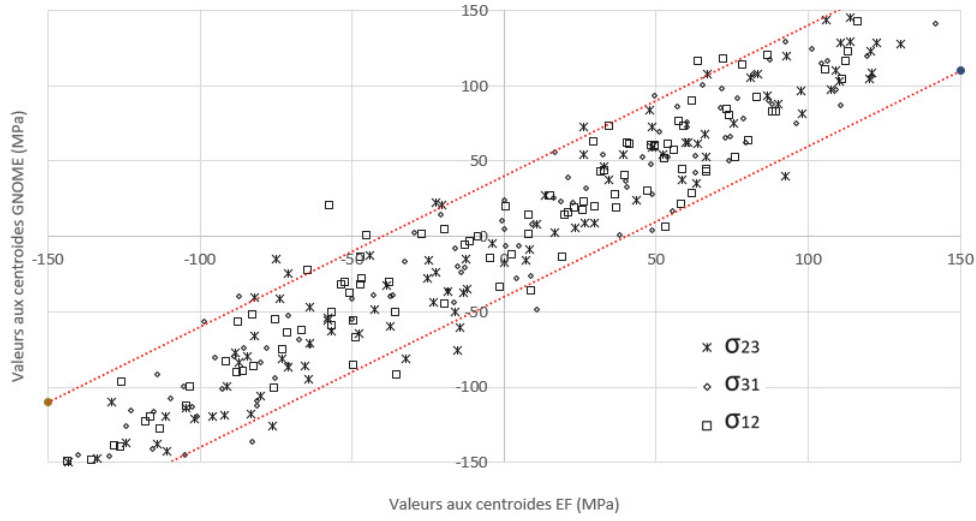


FIGURE 4.31 – Agrégat de 110 grains, 316L - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en glissement simple, tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ - contraintes de cisaillement avec barres d'erreurs à ± 40 MPa

Les écarts absolus maximums relevés sont de 62.9 MPa pour les composantes normales (33.5 MPa pour les composantes de cisaillement) en déformation uniaxiale et de 140 MPa pour les composantes normales (resp. 78.3 MPa) en glissement simple, des écarts bien plus importants à toutefois pondérer par les valeurs atteintes qui sont également plus importantes que pour le Titane : en effet, lorsqu'on regarde la contrainte équivalente à l'infini dans un agrégat chargé en déformation uniaxiale (resp. en glissement simple), elle est de 153.4 MPa (resp. 265.7 MPa) s'il s'agit d'un agrégat de 316L et de 86.8 MPa (resp. 150.4 MPa) s'il s'agit d'un agrégat de Titane.

Comme dit précédemment, dans l'agrégat central de 110 grains, certains d'entre eux n'ont pas le même voisinage selon qu'on est dans la simulation EF (ils sont en partie entourés par le milieu effectif isotrope) ou dans la simulation GNOME (ils sont entièrement entourés par des grains pourvus d'une OC et des propriétés cristallographiques). A cette première source d'erreur - d'autant plus visible sur le 316L que l'anisotropie de sa maille cristalline est plus marquée que celle du Titane - peut s'en ajouter une deuxième : lorsque les voisins adjacents à un grain d'intérêt ont une OC très différente (impliquant une rigidité projetée dans une direction bien plus élevée ou bien plus faible), cela génère un gradient de propriétés assez élevé à l'origine de gradients de contraintes sévères que les simulations EF ont du mal à gérer (sous-sections 3.4.2 et 3.5.3 du chapitre 3 notamment).

Note : Les temps de calcul moyens respectifs sur la même machine (12 coeurs, 31 Go de mémoire) sont de 4h pour la simulation EF contre 2 minutes pour l'outil GNOME, soit un ratio moyen de rapidité de 120 en faveur de l'outil GNOME.

4.5 Bilan du chapitre IV

Différentes méthodes de génération d'agrégats ont été vues, permettant de passer de la structure de Kelvin, utile mais trop régulière pour modéliser des effets morphologiques, aux structures de Voronoï, Laguerre et Johnson-Mehl. Si la validation et la discussion des résultats ont été réalisées avec la tessellation de Voronoï, les autres tessellations ont également été implémentées, notamment la tessellation de type Johnson-Mehl Anisotrope, en vue de préparer la modélisation future d'un agrégat macroscopiquement anisotrope (chapitre 6).

La façon dont le grain - de forme initialement quelconque - est approximé par un sphéroïde pour les besoins du module EIM tel que développé dans le chapitre 3 est ensuite détaillée. Cette méthode repose sur l'obtention de la matrice d'inertie du grain, sa diagonalisation, et l'approximation du moment d'inertie médian pour déterminer la nature *Prolate* ou *Oblate* du sphéroïde "*inertielllement équivalent*". On rappelle par ailleurs que l'orientation spatiale du sphéroïde ainsi obtenue est directement liée à celle des principaux axes d'inertie du grain approximé. Cette méthode peut fonctionner avec n'importe quelle tessellation. Toutefois, une amélioration pourrait être d'appliquer l'EIM avec trois moments d'inertie et de repositionner l'approximation sphéroïdale au centre de gravité réel du grain et non en son germe - qui peut être excentré, comme on l'a vu plus haut. La généralisation de l'EIM à un ellipsoïde quelconque impliquera la résolution numérique d'intégrales elliptiques, mais d'une part la morphologie sera mieux prise en compte et le temps de calcul restera inférieur à celui d'une simulation en champs complets.

Afin d'identifier la topologie, autrement dit les voisins de chaque grain dans l'agrégat polycristallin, étape nécessaire à l'AC au coeur du modèle de Bretin-EIM, la méthode du cadastre a été retenue pour sa souplesse d'emploi, adaptable à n'importe quelle tessellation et agissant à partir de la forme originale de chaque grain. Cette méthode repose sur un paramètre, le rayon cadastral, à choisir par l'utilisateur et qui permet de définir la profondeur du voisinage pris en compte pour chaque grain dans l'AC. Cette méthode présente actuellement quelques limites lorsque le grain possède une très forte acuité géométrique, mais une perspective de développement a été proposée. Le module de Bretin-EIM développé au chapitre 3 est désormais précédé d'un module de génération de microstructures polycristallines, d'un module d'approximation des grains et d'un module d'identification des voisins pour l'AC devenu irrégulier. L'ensemble mène à l'outil de calcul baptisé GNOME.

La sensibilité des contraintes prédites par l'outil GNOME aux centroïdes des grains composant l'agrégat à la distribution d'OC a été étudiée en fonction du nombre de grains considérés dans l'agrégat. Cela a été réalisé pour deux tailles différentes de voisinage autour de chaque grain, c'est à dire pour deux valeurs différentes de rayon cadastral et pour le 316L. Pour ces deux valeurs et pour les deux chargements étudiés, un agrégat de 600 grains paraît raisonnable en offrant un bon compromis entre optimisation du nombre de grains et sensibilité des résultats à la distribution d'OC à la fois modérée et comparable à celle obtenue par Bretin avec 686 grains.

L'influence du nombre de voisins sur le tenseur de contraintes aux centroïdes des grains d'intérêt a été également abordée. Si la majeure partie des grains ne voient que peu de variations de contraintes à leur centroïde lorsque plus de voisins sont pris en compte, de 4 à 24% des grains de l'agrégat peuvent subir des variations de plus de 10% selon la composante de contrainte considérée et selon le chargement externe appliqué. Certains grains voient des composantes de contraintes augmenter et d'autres diminuer simultanément. D'autres grains connaissent une variation monotone de l'ensemble de leurs composantes de contraintes lorsque le rayon cadastral augmente. Dans les deux cas, la taille relative des grains semble être une cause probable mais il ne semble pas y avoir de voisins récurrents ou remarquables à l'origine des variations observées.

Le GNOME a ensuite été confronté à des simulations EF de référence utilisant le même agrégat *via* le logiciel de tessellation Neper pour des chargements élastiques de déformation uniaxiale et de glissement simple, sur 4 grains centraux puis sur l'agrégat entier. Il a été montré que le GNOME parvenait à reproduire correctement le champ local aux centroïdes des grains d'un agrégat de Titane α mais s'avérait moins précis pour les agrégats de 316L. Pour les 4 grains centraux étudiés, les résultats du GNOME ont révélé une faible sensibilité au rayon cadastral semblant suggérer que ce sont les voisins immédiats qui, dans les cas étudiés, gouvernaient l'état de contrainte aux centroïdes de ces grains. Enfin, des explications peuvent être avancées pour expliquer les différences par rapport aux solutions EF, comme le fait de calculer le tenseur des contraintes aux seuls centroïdes, l'approximation sphéroïdale (l'erreur d'approximation sur la morphologie des grains était toutefois la même pour les deux matériaux, l'agrégat étant le même, mais son impact a pu être exacerbé pour le 316L dont la maille possède une élasticité anisotrope plus forte) ou encore la présence de gradients de contraintes pouvant générer des erreurs dans les calculs en champs complets, ces gradients étant accentués lorsque l'anisotropie de la maille cristalline augmente (cas du 316L).

Chapitre 5

Influence de l'effet de voisinage sur les champs locaux

Contents

5.1	Influence des caractéristiques d'une inclusion isolée sur le champ local	106
5.1.1	Influence de la forme et du rapport de forme	106
5.1.2	Influence de l'orientation spatiale sur la contrainte interne à l'inclusion	107
5.1.3	Influence de l'orientation spatiale de l'inclusion sur le champ local environnant	110
5.2	Généralités sur l'étude des agrégats	113
5.3	Observations sur les morphologies des différents agrégats	115
5.4	Etude de l'acier 316L	118
5.4.1	Distribution d'OC aléatoire en déformation uniaxiale	118
5.4.2	Distribution d'OC aléatoire en glissement simple	122
5.4.3	"Optimisation" d'un voisinage donné	128
5.5	Etude du Titane	133
5.5.1	Distribution d'OC aléatoire <i>vs</i> Distribution de Burgers en déformation uniaxiale	133
5.5.2	Distribution d'OC aléatoire <i>vs</i> Distribution de Burgers en glissement simple	137
5.6	Effet de la présence de carbures	142
5.6.1	Forme, Volume et nombre de voisins	142
5.6.2	Influence du voisinage "granulaire" sur les carbures	145
5.6.3	Influence d'un voisinage "carburé" sur les grains	147
5.7	Bilan du chapitre V	149

Ce chapitre rassemble les résultats et cas d'application des chapitres 3 (module EIM) et 4 (outil GNOME). De ce fait, il peut être grossièrement divisé en deux parties : une première partie (section 5.1) veut montrer l'influence des caractéristiques morphologiques d'une inhomogénéité sphéroïdale (forme, rapport de forme, orientation spatiale, orientation cristallographique) sur le champ des contraintes, aussi bien dans l'inclusion que dans son proche environnement. Cette première partie utilise le module EIM et se situe dans le prolongement du cadre théorique défini au chapitre 3.

Dans une deuxième partie, les résultats de simulations sur l'acier austénitique 316L (section 5.4), puis sur le Titane α (section 5.5) sont accumulés en vue de développer une approche statistique afin de mieux appréhender le rôle de la microstructure - et plus particulièrement des voisinages des grains - sur le champ local, notamment les extremums locaux. L'objectif est également d'identifier les configurations néfastes et de construire un "voisinage optimisé" afin de quantifier l'amplitude maximale de l'effet du voisinage. Cette deuxième partie constitue le prolongement du chapitre 4.

5.1 Influence des caractéristiques d'une inclusion isolée sur le champ local

Cette section concerne exclusivement le cas d'une inhomogénéité élastique anisotrope de forme *Oblate* ou *Prolate* dans un milieu élastique linéaire isotrope. Pour plus de fluidité dans cette section mais aussi dans le bilan du chapitre 5, on emploiera le terme d'inclusion à la place du terme plus rigoureux d'inhomogénéité. L'attention sera portée sur l'influence du rapport de forme et de l'Orientation Spatiale (OS) sur le champ de contrainte local à l'intérieur et/ou à l'extérieur de l'inclusion. Dans une première partie (sous-section 5.1.1), l'inclusion n'est pas orientée et différents rapports de forme sont considérés, tandis que dans le reste de cette section, l'influence de l'OS est étudiée pour un rapport de forme donné dans l'inclusion (sous-section 5.1.2) et dans la matrice environnante (sous-section 5.1.3). Les propriétés cristallines pour l'inclusion anisotrope ainsi que les propriétés élastiques pour le milieu isotrope sont les mêmes que celles définies au chapitre 3, sous-section 3.5.1. L'orientation cristallographique de l'inclusion est choisie pour maximiser le contraste de rigidité avec le milieu infini environnant dans la direction de chargement (cas de la traction et de la déformation uniaxiale).

5.1.1 Influence de la forme et du rapport de forme

Des simulations ont été réalisées afin de quantifier l'influence du rapport de forme k de l'inclusion sphéroïdale sur le champ de contrainte lorsqu'aucune orientation spatiale n'est considérée. Des valeurs variant de $k = 1$ (forme sphérique) à $k = 20$ ont été étudiées. Les simulations ont été effectuées pour chaque forme (*Prolate* et *Oblate*) et pour deux types de chargement (traction uniaxiale et glissement simple, voir sous-section 3.2.1, chapitre 3). L'orientation cristallographique de l'inclusion a été choisie pour maximiser le contraste de rigidité avec le milieu infini environnant dans la direction de la traction : $[-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$ pour la forme *Prolate* et $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$ pour la forme *Oblate* (chapitre 3, sous-section 3.5.1). Sur la figure 5.1, est montrée la contrainte de von Mises à l'intérieur de l'inclusion. Afin de mieux mettre en évidence l'influence du rapport de forme, les valeurs de contrainte sont normalisées par la valeur obtenue pour l'inclusion sphérique ($k = 1$).

Pour la forme *Oblate*, l'écart du niveau de contrainte par rapport à la forme sphérique ne dépasse pas 3%, quelque soit le chargement. En effet, en traction uniaxiale pour l'*Oblate*, l'acuité géométrique de l'inclusion dans la direction du chargement n'est que faiblement influencée par le rapport de forme k ce qui conduit probablement au faible effet observé sur le niveau de contrainte. Au contraire, l'acuité de l'inclusion dans la direction de la traction pour la forme *Prolate* augmente fortement avec le rapport de forme comme le confirme l'écart observé (+16%) par rapport à la forme sphérique. Un comportement presque asymptotique apparaît lorsque $k \approx 16$. La sensibilité de la contrainte de von Mises dans l'inclusion *Prolate* au rapport de forme est moins prononcée sous glissement simple, avec une tendance asymptotique lorsque $k \approx 7$ et une variation maximale de -5% par rapport à la forme sphérique.

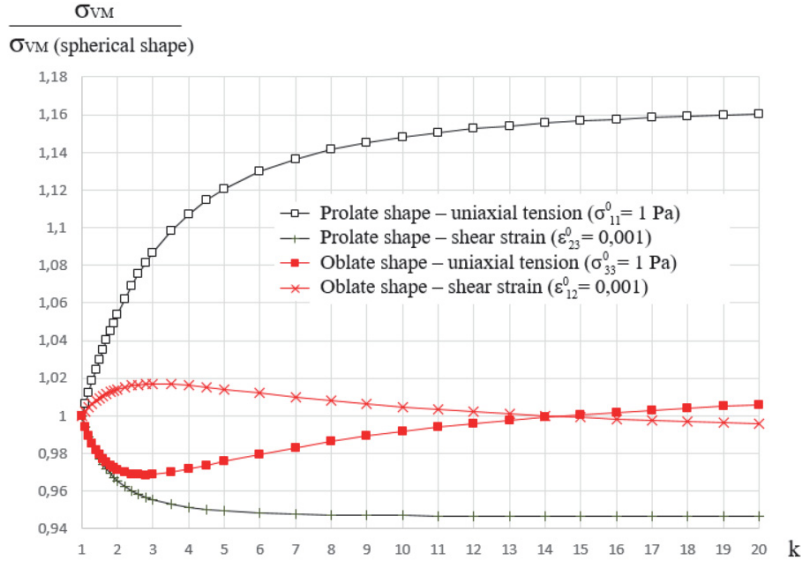


FIGURE 5.1 – Contrainte de von Mises normalisée dans les inclusions anisotropes en fonction du rapport de forme pour les formes *Prolate* et *Oblate*, avec des OC respectives de $[-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$ et $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$, sous glissement simple et de traction uniaxiale à l’infini. Les valeurs de contrainte sont normalisées par la valeur obtenue pour une sphère avec la même orientation cristallographique

Après avoir considéré une non-orientation spatiale et un rapport de forme variable, les deux sous-sections suivantes fixent le rapport de forme à $k = 5$ et font varier l’orientation spatiale de l’inclusion, étudiant respectivement la contrainte dans l’inclusion (sous-section 5.1.2) et dans le milieu infini, proche de l’interface (sous-section 5.1.3)

5.1.2 Influence de l’orientation spatiale sur la contrainte interne à l’inclusion

Cette sous-section traite de l’effet de l’orientation spatiale sur le niveau de contrainte (exprimé *via* la contrainte équivalente de von Mises) à l’intérieur d’une inclusion anisotrope, *Prolate* ou *Oblate*. Le rapport de forme est fixe et égal à 5. Une large campagne de simulations a été réalisée dans ce but, pour 3 types de chargements (traction uniaxiale, déformation uniaxiale et cisaillement) et différentes OS. Rappelons que l’orientation spatiale de l’inclusion est modélisée par deux angles indépendants : les angles ψ et θ pour la forme *Oblate* et les angles θ et φ pour la forme *Prolate* (voir sous-section 3.2.2, chapitre 3).

Des incréments de 15° ont été considérés, allant de 0° à 345° pour le premier angle, et de 0° à 180° pour le second, ce qui permet de balayer l’ensemble de l’espace. Seuls les résultats pour la traction uniaxiale et le cisaillement sont présentés ici, les tendances observées pour la déformation uniaxiale étant analogues à celles de la traction uniaxiale. Afin de faciliter les comparaisons, une valeur de contrainte unitaire de 1 Pa a été appliquée à l’infini pour la traction uniaxiale et le cisaillement. Pour une approche progressive, deux configurations ont été envisagées en ce qui concerne l’orientation cristallographique de l’inclusion : dans le premier cas, le système d’axes cristallographiques coïncide avec le repère global ($[\psi_C \theta_C \varphi_C] = [0^\circ 0^\circ 0^\circ]$), tandis que dans le second, l’orientation cristallographique est choisie de manière à maximiser le contraste de rigidité dans la direction de la traction, comme dans la sous-section précédente.

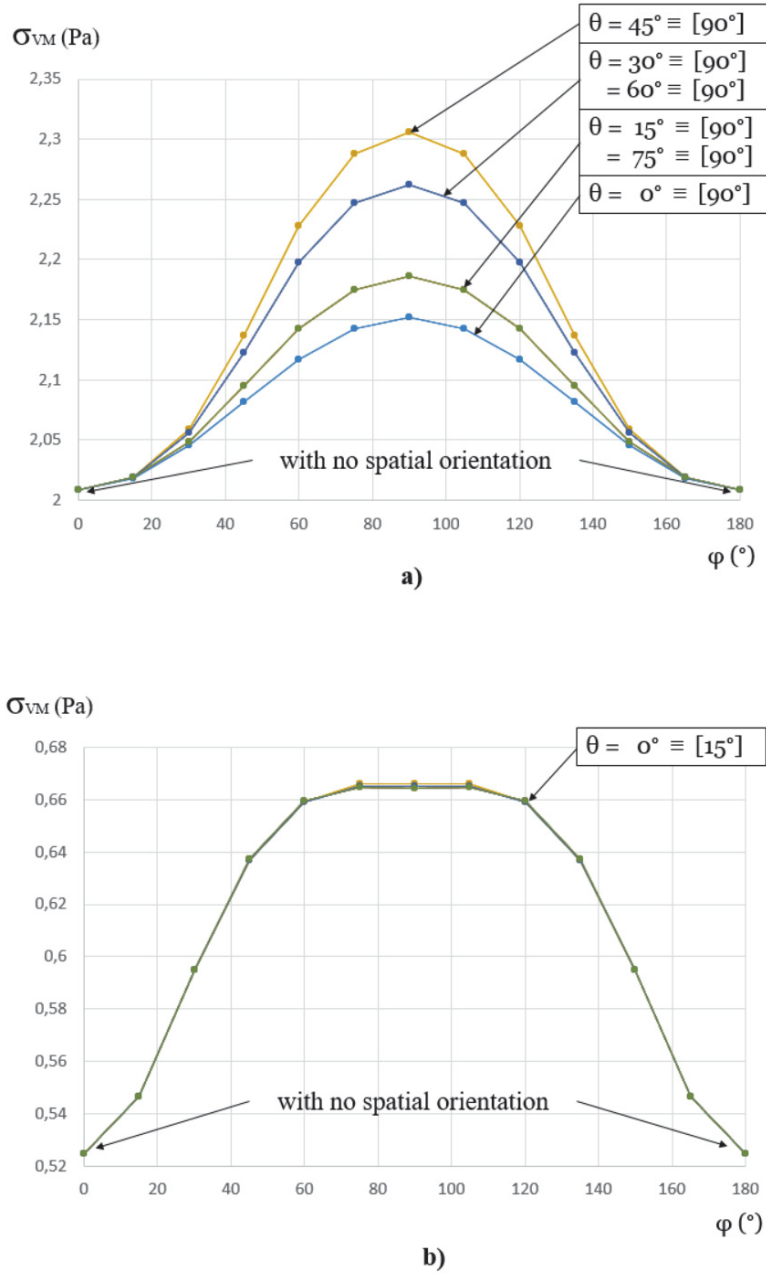


FIGURE 5.2 – Inclusion anisotrope *Prolate* ($OC = [0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$, $k = 5$). Évolution de la contrainte de von Mises au centre de l’inclusion en fonction de φ pour différentes valeurs de θ , cisaillement dans le plan $(X_2; X_3)$, tel que $\sigma_{23}^0 = 1 \text{ Pa}$ (a) ; traction uniaxiale le long de l’axe X_1 , telle que $\sigma_{11}^0 = 1 \text{ Pa}$ (b)

Pour illustrer les résultats obtenus dans la première configuration ($OC = [0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$), la figure 5.2 présente l’évolution obtenue pour la forme *Prolate*. La contrainte de von Mises est représentée en fonction de φ pour différentes valeurs de θ , pour du cisaillement (figure 5.2a) et de la traction uniaxiale (figure 5.2b). Pour les deux charges, les courbes sont symétriques par rapport à l’axe vertical $\varphi = 90^\circ$; les courbes pour le cisaillement sont identiques pour chaque valeur de $\theta \text{ modulo } 90^\circ$ tandis qu’aucune dépendance vis-à-vis de θ n’est observée en traction, comme prévu. Les conclusions sont les mêmes pour la forme *Oblate* avec la permutation du rôle des angles, à savoir avec ψ et θ remplaçant θ et φ , respectivement.

La valeur minimale de la contrainte de von Mises dans l'inclusion a été obtenue pour la même orientation spatiale pour les deux chargements : à $OS = [0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$ pour la forme *Prolate*, comme le montre la figure 5.2, et pour $\psi = \theta = 90^\circ$ pour la forme *Oblate* (on rappelle que pour cette forme, φ n'a aucun effet). Enfin, l'orientation spatiale a entraîné une différence (par rapport au cas $OS = [0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$) comprise entre -22% (obtenue pour la forme *Oblate* en cisaillement) et +27% (obtenue pour la forme *Prolate* sous traction uniaxiale, figure 5.2b).

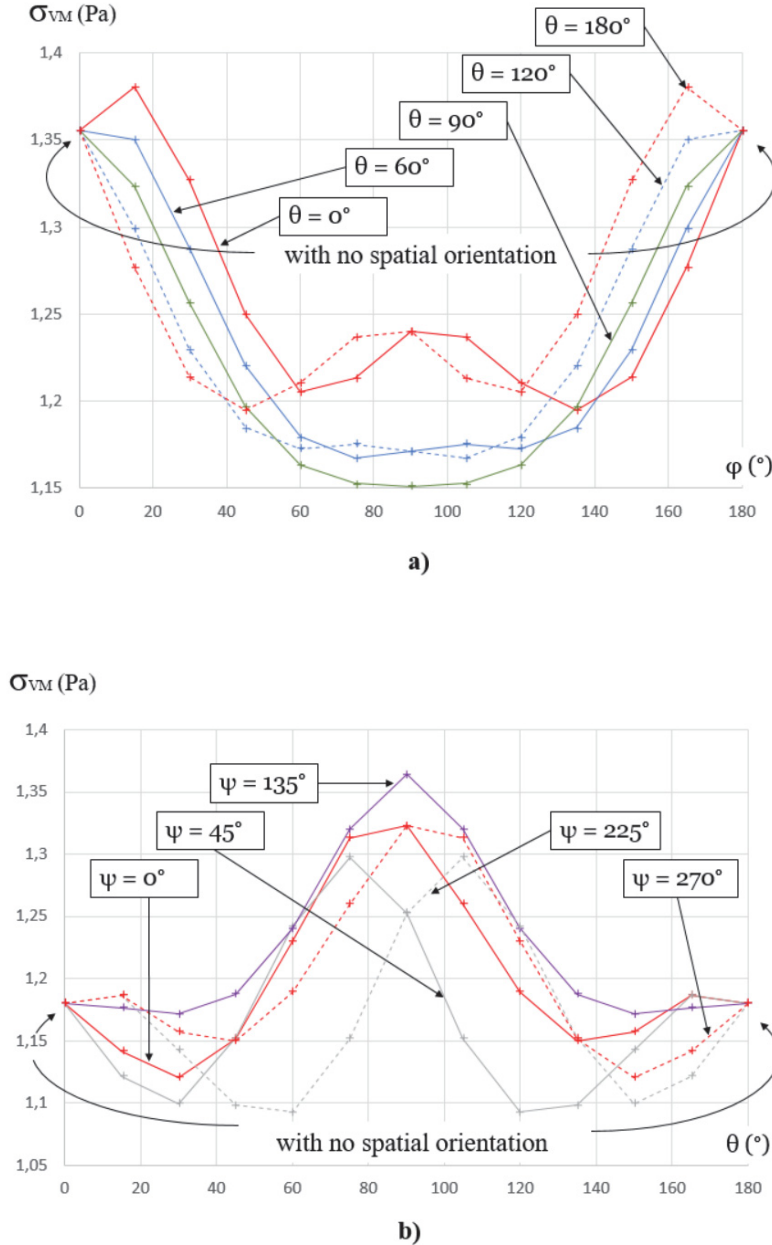


FIGURE 5.3 – Évolution de la contrainte de von Mises au centre d'inclusions anisotropes à $k = 5$ pour différentes OS. Inclusion *Prolate* anisotrope ($OC = [-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$), traction uniaxiale le long de l'axe global X_1 , telle que $\sigma_{11}^0 = 1\text{Pa}$ (a) ; Inclusion *Oblate* anisotrope ($OC = [45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$), traction uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\sigma_{33}^0 = 1\text{Pa}$ (b)

Un décalage des axes du repère de la maille cristalline par rapport au repère global complique les symétries observées. Comme prévu, le type de symétrie dépend de la forme de

l'inclusion mais pas du chargement. Par conséquent, *les résultats sont donnés pour les deux formes uniquement pour la traction uniaxiale* (figure 5.3). L'OC choisie ($[-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$ pour la forme *Prolate* et $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$ pour la forme *Oblate*) maximise le contraste matériau entre l'inclusion et le milieu infini dans la direction de la traction.

Sur la figure 5.3a, concernant la forme *Prolate*, on peut observer que l'évolution de la contrainte de von Mises pour $\theta = 90^\circ$ reste symétrique par rapport à l'axe vertical $\varphi = 90^\circ$ mais ce n'est pas le cas pour d'autres valeurs de θ contrairement à ce qui avait été observé dans la figure 5.2 pour la même charge de traction appliquée à l'infini. De plus, l'évolution pour $\theta = 90^\circ$ est décroissante pour φ entre 0° et 90° , alors que c'était l'inverse dans la figure 5.2.

Pour toute valeur de θ fixée et dans l'intervalle $[0^\circ; 90^\circ]$, l'évolution de la contrainte de von Mises avec φ augmentant de 0° à 180° est analogue à l'évolution obtenue pour θ dans l'intervalle $[90^\circ; 180^\circ]$ lorsque φ passe de 180° à 0° . Les courbes rouges pour $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 180^\circ$, ainsi que les courbes bleues pour $\theta = 60^\circ$ et $\theta = 120^\circ$, illustrent cette observation. Cette règle de symétrie a également été observée pour θ dans l'intervalle $[180^\circ; 270^\circ]$ en correspondance avec θ dans l'intervalle $[270^\circ; 360^\circ]$. Toutes les courbes (non reportées ici pour une meilleure lisibilité) étaient contenues dans l'enveloppe générée par les courbes correspondant à des θ égaux à $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$, montrés sur la figure 5.3a. L'orientation spatiale entraîne une différence par rapport au cas OS = $[0^\circ 0^\circ 0^\circ]$ qui est donc compris entre -15% (obtenue pour $\theta = \varphi = 90^\circ$) et +2% (obtenue pour $\theta = 0^\circ, \varphi = 15^\circ$ ou pour $\theta = 180^\circ, \varphi = 165^\circ$).

Des observations similaires ont été faites pour la forme *Oblate* sous traction uniaxiale. Tout d'abord, l'évolution de la contrainte de von Mises pour $\psi = 135^\circ$ est symétrique par rapport à l'axe vertical $\theta = 90^\circ$ mais ce n'est pas le cas pour d'autres valeurs de ψ .

Pour toute valeur de ψ dans l'intervalle $[0^\circ; 135^\circ]$, l'évolution de la contrainte de von Mises avec θ augmentant de 0° à 180° est analogue à l'évolution obtenue pour ψ dans l'intervalle $[135^\circ; 270^\circ]$ lorsque θ diminue de 180° à 0° . Les courbes rouges pour $\psi = 0^\circ$ et $\psi = 270^\circ$, ainsi que les courbes grises pour $\psi = 45^\circ$ et $\psi = 225^\circ$, obéissent à cette règle de symétrie. Cette dernière a également été observée pour ψ dans l'intervalle $[270^\circ; 315^\circ]$ en correspondance avec ψ dans l'intervalle $[315^\circ; 360^\circ]$. Toutes les courbes sont contenues dans l'enveloppe générée par les courbes correspondant à des ψ égaux à $45^\circ, 135^\circ, 225^\circ$ montrées sur la figure 5.3b. L'orientation spatiale conduit à une différence (par rapport au cas à OS = $[0^\circ 0^\circ 0^\circ]$) qui est donc comprise entre -7% (obtenue pour $\psi = 45^\circ, \theta = 120^\circ$ ou $\psi = 225^\circ, \theta = 60^\circ$) et +16% (obtenue pour $\psi = 135^\circ, \theta = 90^\circ$).

Après avoir caractérisé l'influence de l'orientation spatiale de l'inclusion sur sa contrainte interne, la sous-section suivante se penche sur les contraintes générées dans le milieu infini et l'hétérogénéité du champ local dues à l'orientation spatiale de l'inclusion sphéroïdale.

5.1.3 Influence de l'orientation spatiale de l'inclusion sur le champ local environnant

On considère toujours une inclusion anisotrope de rapport de forme $k = 5$, *Prolate* puis *Oblate*. Le chargement, les OS et OC sont définis de la même manière que dans la sous-section précédente. La figure 5.4 concerne un sphéroïde *Oblate* (OC = $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$) soumis à une traction uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\sigma_{33}^0 = 1\text{Pa}$. L'évolution de la contrainte équivalente de von Mises est mesurée le long de l'axe global X_2 à partir de l'interface avec l'inclusion. Les résultats sont présentés pour 4 OS différentes : $\theta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ ($\psi = \varphi = 0^\circ$). Deux médaillons permettent d'agrandir le début et la fin des courbes.

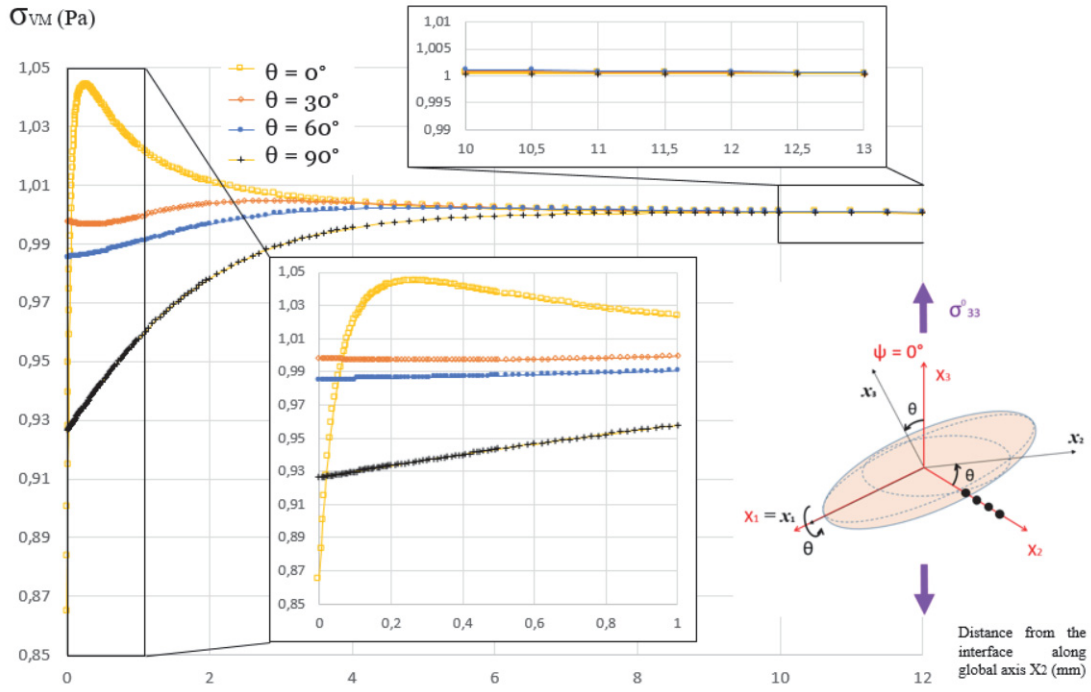


FIGURE 5.4 – Inclusion *Oblate* anisotrope ($OC = [45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$, $k = 5$). Evolution de la contrainte de von Mises en fonction de la distance à l'interface le long de l'axe global X_2 , pour différentes valeurs de θ ($\psi = \varphi = 0^\circ$). Traction uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\sigma_{33}^0 = 1$ Pa

Pour chaque OS, le gradient de contrainte dû au contraste matériau reste localisé près de l'interface. Lorsque $OS = [0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$, la direction de traction coïncide avec l'axe de révolution de l'inclusion, le chemin de mesure étudié (le long de l'axe global X_2) est alors colinéaire avec l'axe morphologique x_2 et commence précisément au point où la courbure de l'interface de l'inclusion *Oblate* avec la matrice est la plus aiguë (à noter que cette criticité serait la même pour toutes les trajectoires de mesure dans le plan (X_1, X_2)). Comme prévu, cela conduit au gradient de contrainte le plus élevé par rapport à ceux observés pour d'autres OS pour lesquelles l'inclusion *Oblate* n'est pas transverse à la direction de traction.

La figure 5.5 montre l'évolution de la contrainte de von Mises pour la même charge de traction et les mêmes OS, mais cette fois le long de l'axe morphologique x_2 . On rappelle que le système d'axes global est fixe alors que le système d'axes morphologiques est attaché au sphéroïde orienté dans l'espace et tourne avec l'inclusion. L'évolution pour $\theta = 0^\circ$ est évidemment identique à celle de la figure 5.4 puisque $x_2 = X_2$ dans ce cas.

Pour chacune des autres orientations spatiales, la figure 5.5 montre que le gradient de contrainte est plus élevé le long de l'axe morphologique x_2 que le long de l'axe X_2 (figure 5.4) puisque la trajectoire de mesure commence, pour chaque orientation considérée, au point où la courbure est la plus aiguë. En particulier, un gradient important est obtenu dans la figure 5.5 pour $\theta = 90^\circ$, lorsque x_2 est également aligné avec la direction de traction, avec une augmentation de +18.2% par rapport à la valeur à l'infini et une lente décroissance couvrant plus de deux fois la demi-longueur maximale de l'inclusion. Notons que dans ce cas, des effets géométriques et anisotropes importants sont combinés puisque l'acuité *et* le contraste des propriétés dans la direction de la traction sont maximisés.

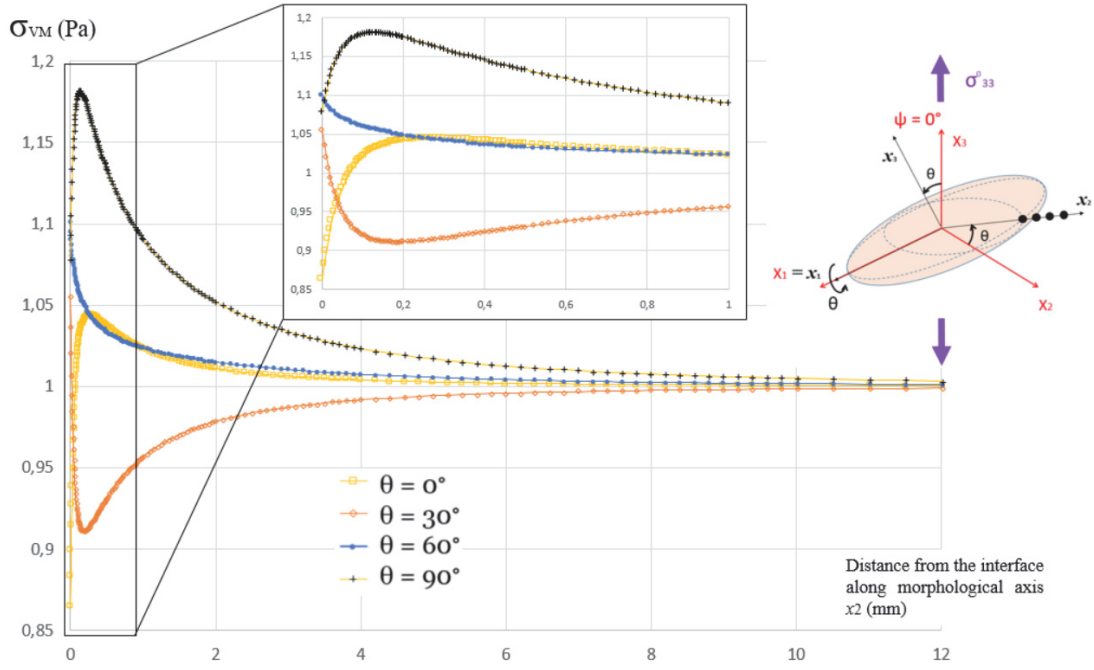


FIGURE 5.5 – Inclusion *Oblate* anisotrope ($OC = [45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$, $k = 5$). Evolution de la contrainte de von Mises en fonction de la distance à l'interface le long de l'axe morphologique x_2 , pour différentes valeurs de θ ($\psi = \varphi = 0^\circ$). Traction uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\sigma_{33}^0 = 1$ Pa

Chemin X_2	$\theta = 0^\circ$	$\theta = 30^\circ$	$\theta = 60^\circ$	$\theta = 90^\circ$
contrainte à l'interface (en Pa)	0.8647	0.9979	0.9856	0.9263
écart maximal au chargement à l'infini (en Pa)	0.1353	0.0047	0.0144	0.0737
localisation de l'écart maximal depuis l'interface	0 mm	2.8 mm	0 mm	0 mm
Chemin x_2	$\theta = 0^\circ$	$\theta = 30^\circ$	$\theta = 60^\circ$	$\theta = 90^\circ$
contrainte à l'interface (en Pa)	<i>identique</i>	1.0552	1.1009	1.0783
écart maximal au chargement à l'infini (en Pa)	<i>identique</i>	0.0886	0.1009	0.1815
localisation de l'écart maximal depuis l'interface	<i>identique</i>	0.185 mm	0 mm	0.125 mm

TABLE 5.1 – Comparaison entre les chemins global (tableau haut) et morphologique (tableau bas) des valeurs de contrainte à l'interface dans la matrice, des écarts maximums et de leur localisation pour les différentes orientations de l'inclusion

Plus généralement, pour les chemins de contraintes colinéaires à l'axe morphologique x_2 à partir de l'orientation $\theta = 60^\circ$ les perturbations générées par l'inhomogénéité deviennent plus critiques que pour l'orientation $\theta = 0^\circ$.

L'influence des caractéristiques morphologiques (forme, rapport de forme, puis orientation spatiale et son couplage avec l'orientation cristallographique) d'une inclusion sphéroïdale ayant été vue, la suite de ce chapitre va utiliser ces résultats pour passer du point de vue du grain-inclusion à celui de l'agrégat, composé d'une multitude de ces grains-inclusions dont les influences se superposent, se contrarient et se combinent. Certaines configurations se révèlent particulièrement néfastes ou au contraire, particulièrement bénéfiques. L'identification de ces configurations est au coeur de cette deuxième partie.

5.2 Généralités sur l'étude des agrégats

Si le voisinage peut grandement modifier la contrainte perçue par un grain, les configurations de voisinage menant à une augmentation de la contrainte dans le grain sont pour l'instant mal connues. Les morphologies rencontrées dans les agrégats sont très variées, trop pour qu'il soit envisageable de les reproduire toutes. Il est donc décidé de mener une étude statistique qui vise donc à mettre en lumière les morphologies ayant un impact significatif sur l'effet du voisinage, notamment celles impliquant une augmentation de la contrainte. De la même manière, cette étude statistique doit faire émerger les tendances et les principaux facteurs responsables des plus importantes variations de contraintes générées par le voisinage. Lorsque ces variations sont des augmentations de contrainte, on parlera de voisinage "nuisible" pour souligner le caractère néfaste de cette augmentation. En effet, dans le cadre de la fatigue HCF/VHCF, une augmentation de la contrainte locale implique une diminution de la durée de vie par exemple. De la même façon, on s'intéressera également aux variations diminuant la contrainte (le voisinage sera alors qualifié de "bénéfique") afin de mettre en lumière les mécanismes provoquant l'effet inverse de celui étudié.

Le 316L est un acier austénitique qui conserve à température ambiante une structure austénitique cubique à face centrées. Il est utilisé dans différents secteurs, de l'industrie pharmaceutique au nucléaire et présente l'intérêt d'une très bonne résistance à la corrosion en plus de propriétés mécaniques élevées [Chniouel, 2019]. Outre son intérêt industriel, la maille d'austénite possède également une très forte anisotropie élastique [Marciszko-Wiackwska et al., 2023] ce qui rendra davantage visible l'effet de l'orientation cristallographique (OC) des grains. Les orientations les plus critiques seront déterminées grâce à des distributions aléatoires de triplets d'angles d'Euler¹.

Le Titane sera le second matériau considéré. Egalement très utilisé par l'industrie, notamment la nuance Ti6Al4V, la maille cristalline du Titane α est de nature hexagonale compact (HC), contrairement à la maille CFC du 316L. Son anisotropie élastique est également moins prononcée que celle du 316L. Comparer - à morphologie fixée - une microstructure d'acier et de Titane permet donc de mettre en lumière l'importance de l'orientation cristalline des grains sur le champ local.

Enfin, dans le cas du Titane, les distributions d'orientations cristallines strictement aléatoires seront confrontées à des distributions d'OC générées à partir des relations de Burgers², plus représentatives d'une microstructure issue d'un refroidissement à partir d'un grain parent β [Le Biavant et al., 2001]. Cela permettra de quantifier l'influence de la morphologie comparée à celle des orientations cristallines de grains sur l'importance de l'effet du voisinage.

Bien qu'il existe une infinité de microstructures possibles, lorsque des distributions d'OC ou des matériaux sont comparés entre eux, la morphologie de l'agrégat utilisé est identique pour que seule l'orientation cristalline, ou l'amplitude d'anisotropie élastique entre en compte. 10 agrégats de 600 grains - inscrits dans un domaine cubique (figure 5.6) - ont été générés pour les besoins de l'étude statistique et sont identifiés par les lettres (a) à (j). Ces agrégats ont été générés à partir du module de génération d'agrégats implanté dans l'outil GNOME et suivent une tessellation de type Voronoï (voir sous-section 4.1.1, chapitre 4).

1. triplets obtenus par la conversion de couples de quaternions générés aléatoirement, voir section 3.6, chapitre 2

2. le détail de ces relations est donné en Annexe C

La distribution des centroïdes est aléatoire et est obtenue par un processus de Points de Poisson 3D. Les microstructures générées sont donc relativement équiaxes, sans texture morphologique. En effet, la théorie d'Eshelby sur laquelle s'appuie le GNOME, suppose un milieu effectif isotrope. D'autre part, la microstructure n'étant pas spécifique à un matériau particulier, il est alors plus facile de confronter différents matériaux entre eux.

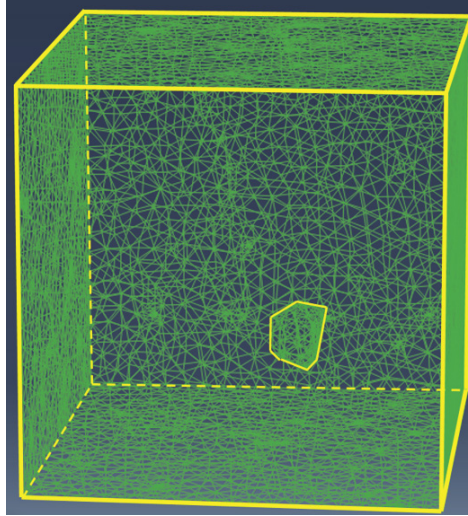


FIGURE 5.6 – Visualisation d'un grain (surligné en jaune) au sein de l'agrégat modélisé par GNOME (visuel tiré de la référence Element Finis)

Le choix d'utiliser 10 agrégats seulement est un compromis entre le temps disponible pour générer les résultats, les analyser et mettre en forme une synthèse claire des tendances obtenues. Dans la perspective d'une réutilisation ou d'une continuation de ces travaux, la génération d'agrégats supplémentaires permettrait de confirmer et d'affiner les tendances observées jusqu'ici. Grâce à une meilleure compréhension des éléments qui contrôlent l'effet du voisinage, des environnements spécifiques peuvent même être générés pour évaluer l'influence des différents paramètres en milieu extrême.

Pour un agrégat donné, 10 distributions d'OC strictement aléatoires ont été générées et sont utilisées aussi bien lorsque l'agrégat se voit attribuer les propriétés matériaux du 316L que celles du Titane. De ce fait, lorsque ces deux matériaux sont confrontés, la distribution d'OC est identique et seule la différence de propriétés matériau - notamment l'anisotropie élastique - est à l'origine des écarts constatés. Pour les simulations sur le Titane α , 10 distributions supplémentaires d'OC où les orientations sont issues des relations de Burgers ont été générées. Bien qu'à chaque point de mesure (ici, les centroïdes de l'agrégat³) le tenseur complet des contraintes soit disponible, pour des raisons de lisibilité, seule la contrainte équivalente de von Mises est utilisée afin de faciliter les comparaisons et quantifier l'influence des voisins.

3. d'une part pour limiter le temps de calcul, l'usage d'une grille régulière impliquant un nombre beaucoup plus élevé de points de mesure, et d'autre part car la grille de points n'était pas encore validée au moment de la génération des résultats

5.3 Observations sur les morphologies des différents agrégats

Comme cela a été constaté dans le chapitre 4 (section 4.4), la majeure partie des grains⁴ générés par la tessellation de Voronoï sont approximés par des *Prolates*, moins contraignants en volume. Les *Oblates* sont donc sous-représentés dans les différents agrégats (26% des grains en moyenne, voir figure 5.7). En conséquence, l'influence (ou la non-influence) de la forme dans les voisinages "nuisibles" se fait en comparant le taux de *Oblates* relevé dans ces voisinages par rapport à ce taux moyen de 26% dans l'agrégat.

Pour chaque configuration (agrégat de 316L, à distribution d'OC aléatoire, agrégat chargé en glissement simple par exemple - *i.e.* les barres bleu foncé de la figure 5.7a), et pour chaque agrégat de (a) à (j), 10 distributions d'OC différentes ont été appliquées et pour chacune de ces distributions, le grain le plus chargé a été relevé, soit 10 grains par agrégat et par configuration (matériau / chargement). Sur ces dix grains, la proportion d'*Oblate* a été relevée. Ainsi, la figure 5.7a montre que pour l'agrégat (a) de 316L chargé en glissement simple à distributions d'OC aléatoires⁵, il y a 60% d'*Oblates* parmi les grains les plus chargés. C'est-à-dire que sur les dix distributions d'OC aléatoires successivement appliquées, dans six cas sur dix, le grain le plus chargé était un *Oblate*.

Le taux moyen d'*Oblates* est systématiquement plus élevé parmi les grains les plus chargés (de 45% à 67% en moyenne pour les différentes microstructures selon les configurations). Dans certaines microstructures, la proportion d'*Oblates* est très importante, dépassant 70% voire atteignant 100%. Tous matériaux, chargements et distributions d'OC confondus la forme *Oblate* semble donc avoir un rôle prépondérant dans l'apparition de contraintes élevées.

Pour le 316L (figure 5.7a), le changement de chargement à l'infini a un effet important sur la proportion d'*Oblates* parmi les grains les plus chargés. En effet, cette dernière passe de 47% à 64% lorsque le chargement passe d'une déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) à un glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$). Pour des distributions d'OC strictement aléatoire donc, la forme des grains les plus chargés semble plus influente pour un chargement de glissement simple que pour un chargement en déformation uniaxiale.

Pour le Titane α , la figure 5.7b montre qu'en moyenne⁶ (zone grisée) le fait de passer de distributions d'OC strictement aléatoires (tons orange clair) à des distributions obéissant aux relations de Burgers (tons orange foncés) augmente la proportion d'*Oblates* parmi les grains les plus chargés. Ceci est probablement dû au fait que lorsque les microstructures sont pourvues de distributions d'OC strictement aléatoires, les grains avec les orientations les plus critiques sont souvent parmi les plus chargés, tandis que les "quelques" orientations cristallographiques (24) permises par les relations de Burgers ont moins de chances d'être critiques vis-à-vis du chargement. L'influence de la morphologie - en particulier la forme - est alors davantage déterminante pour l'obtention des grains les plus chargés.

4. les sphéroïdes dont il est question dans cette section sont les approximations sphéroïdales des grains associés (sous-section 4.2.2, chapitre 4). Afin d'alléger le propos, cette approximation (utilisée pour la théorie d'Eshelby) sera aussi désignée sous le terme "grain" - même s'il s'agit d'un abus de langage

5. c'est-à-dire la première barre bleu foncé de la figure 5.7a

6. Les barres noires ne servent ici qu'à rappeler le taux moyen d'*Oblates* dans tout l'agrégat, pour chaque agrégat. La colonne grisée reprend les valeurs moyennes et les écarts-types sur les dix agrégats considérés. On constate que ce taux (26%) ne varie que très peu d'un agrégat à l'autre, ce qui montre que cette faible proportion n'est pas due à un hasard statistique

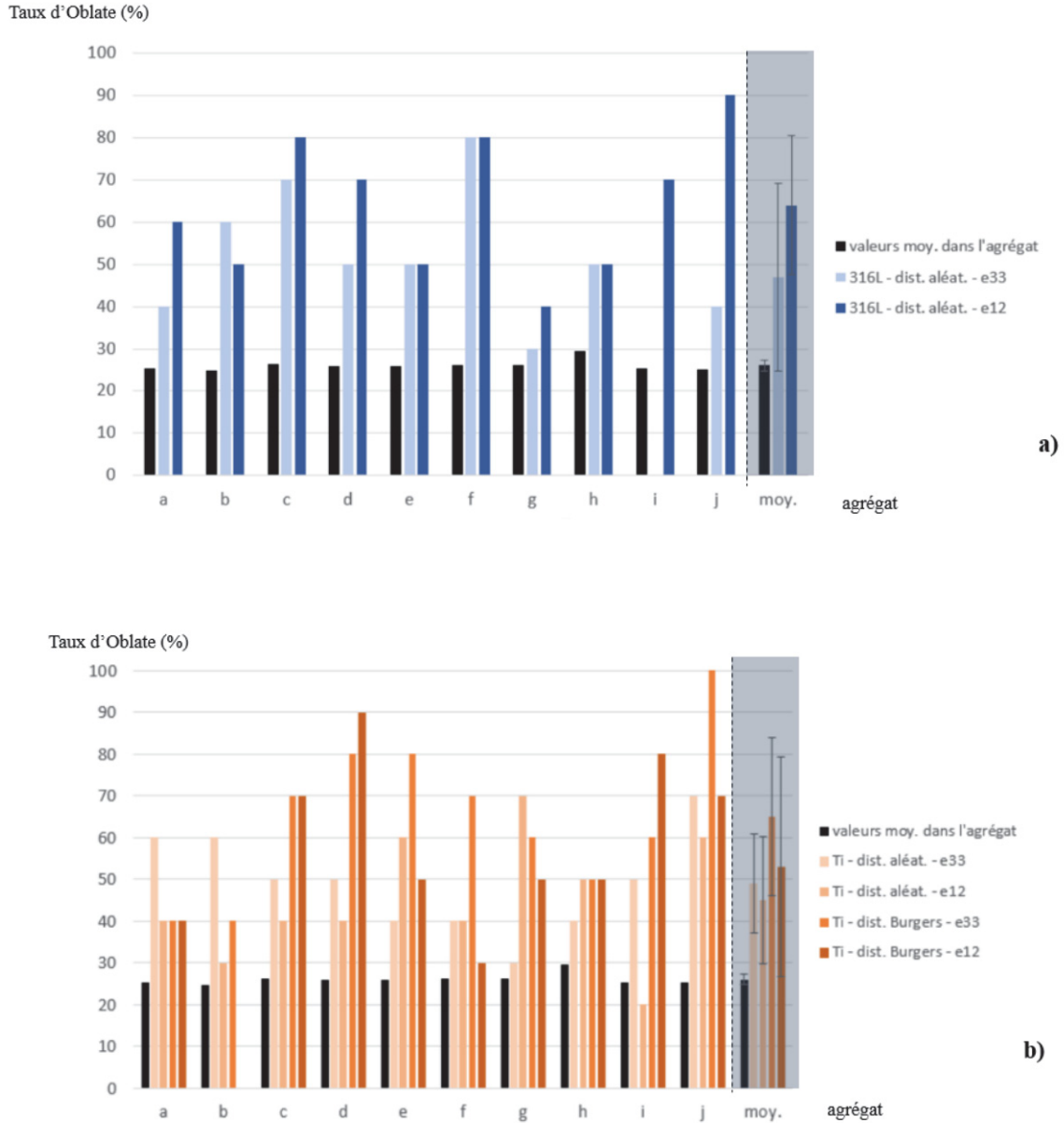


FIGURE 5.7 – Taux de présence des formes *Oblates* parmi les grains les plus chargés des différents agrégats (de (a) à (j) et valeurs moyennes sur les 10 agrégats), pour différentes configurations (en noir, la valeur de référence dans l'agrégat tout entier), pour un chargement telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$, puis tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$, ce pour le 316L (a) puis le Titane α (b)

Pour le Titane α (figure 5.7b), le type de chargement à l'infini a un faible effet sur la proportion d'*Oblates* pour les agrégats avec des distributions d'OC strictement aléatoires. En effet, la proportion d'*Oblates* parmi les grains les plus chargés passe de 49% à 45% lorsque le chargement passe d'une déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) à un glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$). *A contrario*, pour les agrégats avec des distributions obéissant aux relations de Burgers, le changement de chargement à l'infini a cette fois un effet plus prononcé sur la proportion d'*Oblates* parmi les grains les plus chargés (65% contre 53%). Il semblerait donc que pour un nombre restreint d'orientations cristallines (cas des distributions de Burgers avec 24 variants), la forme parmi les grains les plus chargés soit plus influente pour un chargement en déformation uniaxiale que pour un glissement simple, tandis que

le chargement n'a pas d'influence sur la proportion d'*Oblates* pour des distributions d'OC strictement aléatoires.

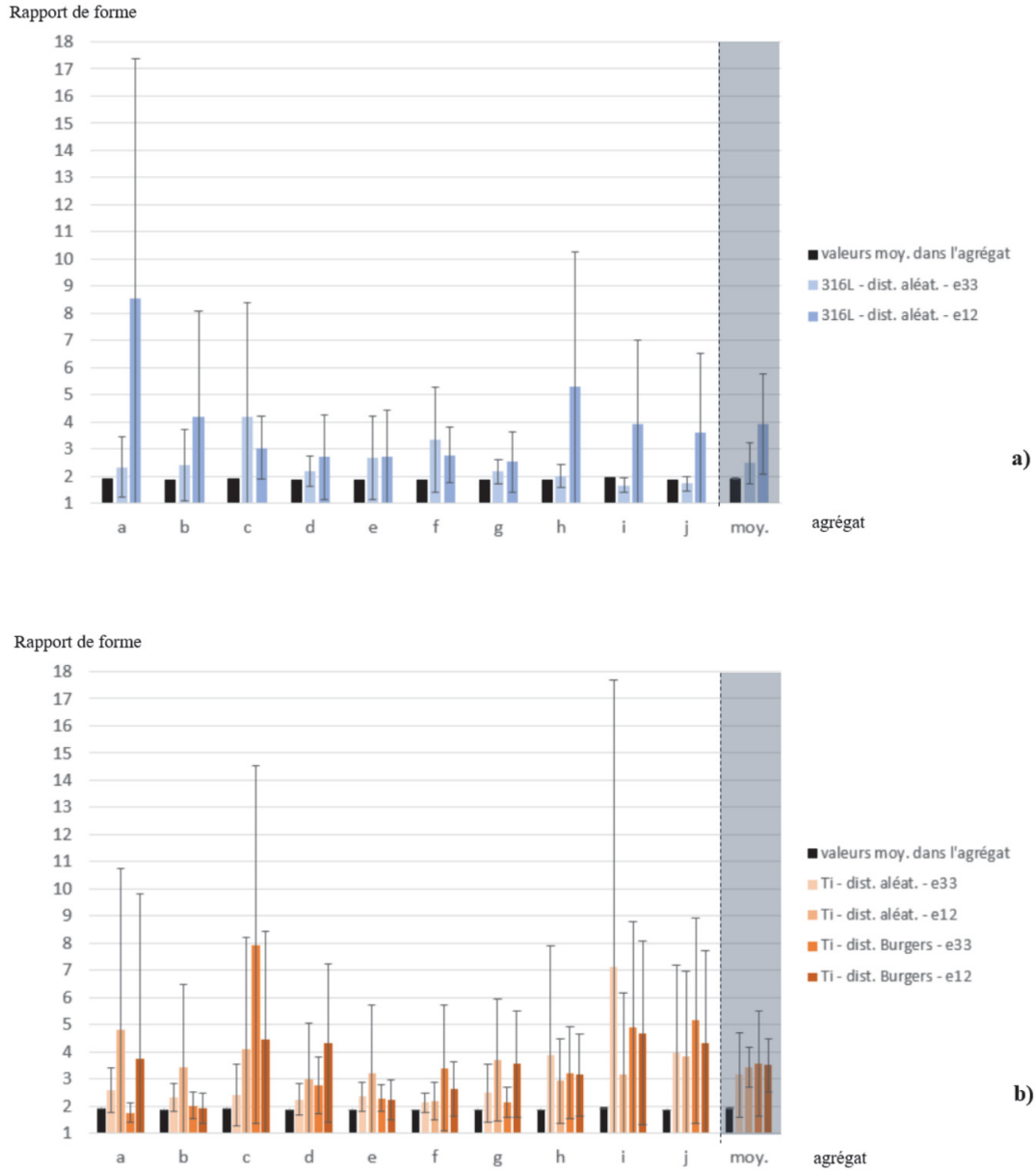


FIGURE 5.8 – Rapports de forme parmi les grains les plus chargés des différents agrégats (de (a) à (j) et valeurs moyennes sur les 10 agrégats avec écarts-types associés), pour différentes configurations (en noir, la valeur de référence dans l'agrégat tout entier), pour un chargement tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$, puis tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$, ce pour le 316L (a) puis le Titane α (b)

Après avoir étudié le taux d'*Oblates* parmi les grains les plus chargés, on veut se pencher sur le rapport de forme de ces grains et les comparer à la moyenne dans les différents agrégats. Les figures 5.8a et b sont organisées de la même manière que les figures 5.7a et b plus haut : à chaque configuration (matériau, type de distribution et chargement) correspond une couleur. Chaque agrégat est traité sur une colonne spécifique et la moyenne des valeurs obtenues est située en zone grisée avec les écarts-types. En noir, les valeurs moyennes dans tout l'agrégat servent de référence et de point de comparaison. Prenons par exemple le cas de l'agrégat (b) de Titane chargé en glissement simple avec successivement

dix distributions d'OC obéissant aux relations de Burgers. Le rapport de forme moyen des grains dans tout l'agrégat est donné par la barre noire de la colonne b. Parmi les dix grains les plus chargés de cet agrégat (b) dans cette configuration, le rapport de forme moyen est de (1.9 ± 0.6) .

Comme pour la proportion d'*Oblates*, le rapport de forme moyen (toutes formes confondues) ne varie que peu entre les différents agrégats (figure 5.8) et reste sensiblement proche de $k_{moy} = 1,9$. Ce rapport de forme est systématiquement plus élevé dans les grains les plus chargés, quelque soit le matériau, le chargement ou même la distribution d'orientations cristallines à laquelle est soumis l'agrégat avec des maximums pouvant aller jusqu'à $k_{max} = 8.5$ générant d'importants écart-types. On a donc une augmentation moyenne de 54% et une augmentation maximale de 347%. Sans que cela soit réellement surprenant, cela prouve néanmoins que l'acuité géométrique - *i.e.* le caractère fortement sphéroïdal des grains - tend à augmenter la contrainte de ces derniers dans l'agrégat.

Pour les deux matériaux, quelque soit le chargement et la distribution d'OC associée, le rapport de forme moyen cache d'importantes disparités d'un agrégat à l'autre du fait de la diversité des morphologies présentes. Pour le 316L (figure 5.8a) comme pour le Titane α (figure 5.8b), le changement de chargement à l'infini (de déformation uniaxiale $\varepsilon_{33} = 0.001$ à glissement simple $\varepsilon_{12} = 0.001$) a des effets contrastés sur le rapport de forme des grains les plus chargés, sans tendance nette, tout comme le passage de distributions d'OC strictement aléatoires à des distributions obéissant aux relations de Burgers (pour le Titane).

5.4 Etude de l'acier 316L

5.4.1 Distribution d'OC aléatoire en déformation uniaxiale

La distribution des valeurs moyennes de contrainte équivalente de von Mises dans les agrégats de 600 grains - chargés ici en déformation uniaxiale - et les maximums relevés pour chaque distribution est visible figure 5.9 ci-dessous : les 10 points rouges en croix de Saint-André (\times) figurent les valeurs moyennes pour les 10 distributions d'OC aléatoires associées à chaque agrégat (a) à (j). Les points bleus situés sur les mêmes colonnes correspondent aux maximums relevés dans les mêmes configurations. Il est important de noter la faible dispersion des moyennes pour les différentes distributions d'un même agrégat, et les différentes distributions d'un agrégat à l'autre. Au contraire, les maximums ont des valeurs assez éparpillées. Ils sont en moyenne 40 à 50% supérieurs aux contraintes moyennes, centrées autour de 160 MPa environ.

On veut désormais quantifier l'influence du voisinage sur les grains les plus chargés. Le niveau de contrainte de ces derniers est donc comparé au cas isolé où le même grain est noyé dans du milieu infini possédant les mêmes propriétés que le milieu effectif. La figure 5.10 présente ainsi les ratios de contrainte avec et sans voisinage, pour chacun des grains - chacun étant le plus chargé de sa distribution, donc les grains derrière les croix bleues de la figure 5.9.

Chaque colonne correspond à un agrégat et chaque agrégat a dix distributions, donc dix points correspondant aux dix grains les plus chargés. Les losanges blancs correspondent à la moyenne arithmétique et permettent d'afficher l'écart-type pour chaque agrégat.

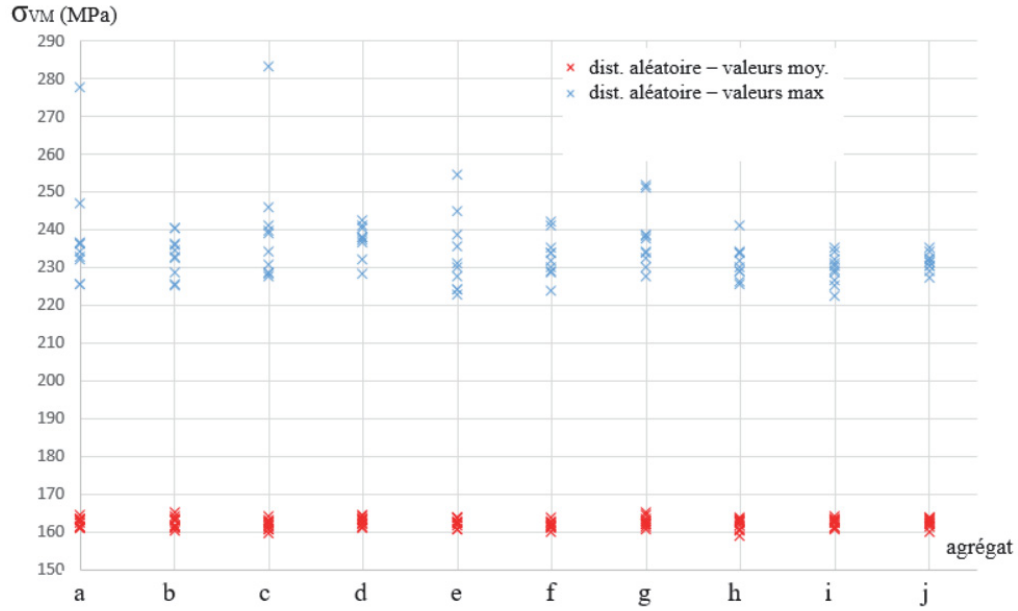


FIGURE 5.9 – Répartition des contraintes de von Mises moyennes (en rouge) et maximales (en bleu) dans les différents agrégats de 316L chargé en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ pour les distributions d'OC aléatoires associées

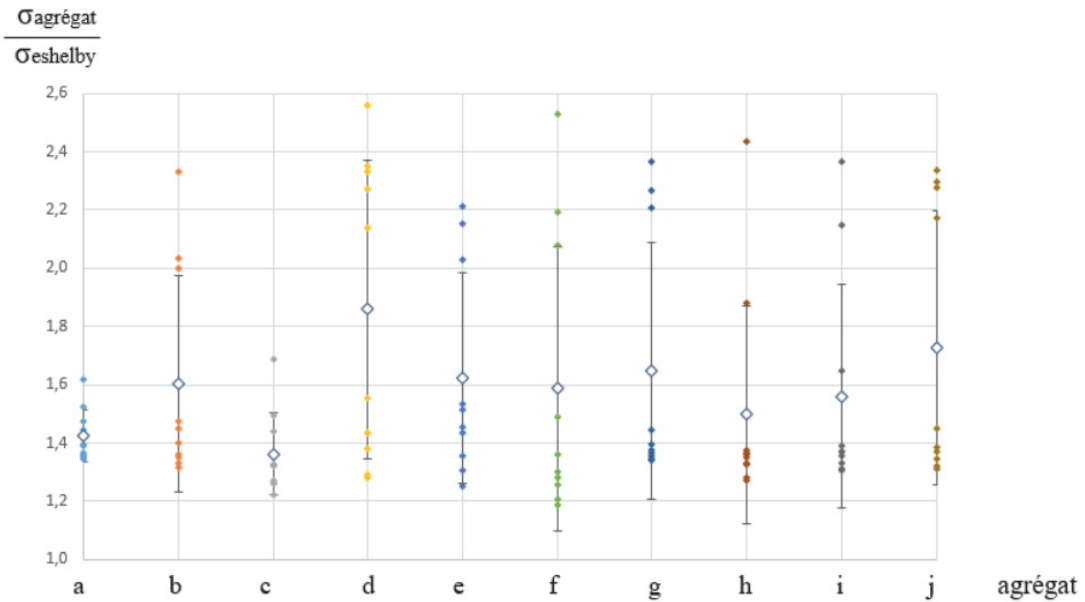


FIGURE 5.10 – Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (aléatoires ici) sont représentées. Chargement en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$

Les grains les plus chargés ont un ratio de contrainte avec et sans voisinage variant entre 1.19 et 2.56 (75% des valeurs étant comprise entre 1.2 et 1.7 et les 25% restant ont un ratio supérieur ou égal à 2) pour les différentes distributions des différents agrégats. La moyenne de l'ensemble des valeurs et son écart-type associé est de (1.59 ± 0.39) . Le ratio est donc très élevé : tenir compte du voisinage provoque donc en moyenne sur ces grains (qui sont les plus chargés de leurs agrégats respectifs) une augmentation de près de 59% de la contrainte qu'ils subissent.

Bien sûr, d'une distribution à l'autre, ce n'est pas toujours le même grain qui est le plus chargé puisque les OC changent. Lorsque le ratio de contrainte est supérieur à 2, cela signifie que la contrainte interne est deux fois plus élevée lorsque le voisinage est pris en compte. Les grains concernés sont alors dits "*fortement influençables*" (vu que leur contrainte interne évolue fortement) et les voisinages associés "*fortement nuisibles*" (vu qu'ils induisent une augmentation très importante de la contrainte). Les voisinages des grains les plus chargés sont donc tous ici systématiquement nocifs en ce sens qu'ils augmentent la contrainte dans les grains les plus chargés et les rendent donc encore plus critique. Concernant le cas le plus extrême (figure 5.10, agrégat d), son voisinage est détaillé ci-dessous :

grain n°	distance au grain A (en mm)	forme	k	pos. relative			Ori. spatiale			volume (en mm ³)
				X ₁	X ₂	X ₃	ψ	θ	φ	
-	0.147	-	1.9	-	-	-	-	-	-	0.0016
492	-	Ob.	2.82	-	-	-	81°	96°	-2°	0.0007
103	0.033	Ob.	8.48	0.016	-0.021	0.020	43°	38	-79°	0.0006
312	0.073	Ob.	1.99	0.013	0.071	-0.004	17°	59°	-8°	0.0016
410	0.105	Pro.	1.6	-0.084	-0.060	-0.019	48°	96°	-58°	0.0014
134	0.106	Pro.	1.89	-0.076	0.068	0.029	67°	79°	-79°	0.0011
101	0.111	Pro.	2.08	0.044	-0.071	-0.073	-22°	100°	-63°	0.001

TABLE 5.2 – Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain critique A (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)

Si seuls les cinq premiers voisins sont détaillés dans le tableau 5.2, il convient de préciser que les informations concernant chaque grain de chaque voisinage de chaque simulation sont accessibles. La problématique n'est ici pas l'accès aux données mais leur tri et leur présentation de façon lisible malgré une très grande quantité de données.

On peut remarquer que le grain critique (ayant le ratio de contrainte le plus élevé) de la figure 5.10 a un volume très faible, inférieur de plus de 50% à la moyenne dans l'agrégat (voir tableau 5.2) et de ce fait possède donc des premiers voisins davantage "proches" de son centroïde et comparativement plus gros que lui (donc plus influents) comme visible sur la figure 5.11. On peut également noter que le grain n°103 possède un rapport de forme très élevé ($k = 8.48$), de ce fait, il provoque d'importants différentiels de déformation dans son environnement immédiat lorsqu'il est soumis à un chargement à cause de son acuité géométrique.

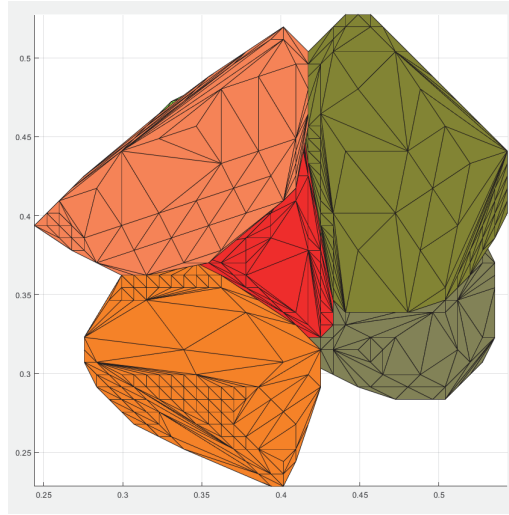


FIGURE 5.11 – grain A (n°492, en rouge) et ses cinq premiers voisins affichés (un des voisins est masqué dans cette vue) sous leur forme polyédrique initiale

Pour résumer : pour du 316L en déformation uniaxiale, le ratio entre la contrainte équivalente de von Mises mesurée aux centroïdes des grains les plus chargés de leurs agrégats respectifs, et la contrainte de von Mises interne aux mêmes sphéroïdes sans tenir compte du voisinage est toujours strictement supérieur à 1. La théorie d'Eshelby sous-évalue donc systématiquement le niveau de contrainte dans les grains les plus chargés pour cette configuration. Les grains les plus chargés présentent par ailleurs une forte surreprésentation des formes *Oblates* (47% *vs* 26%). Aucune tendance n'est observée sur les grains les plus chargés concernant l'orientation spatiale des grains, du fait de la tessellation de Voronoï qui ne permet pas l'apparition de texture morphologique.

Le maximum local va dépendre entre autre de la criticité de l'orientation cristalline de chaque grain. Dans le cas des distributions d'OC aléatoires, les grains les plus chargés sont donc logiquement ceux qui possèdent l'orientation cristalline la plus critique (chapitre 3, sous-section 3.4.2 pour la définition de cette orientation) comme l'illustre la figure 5.12.

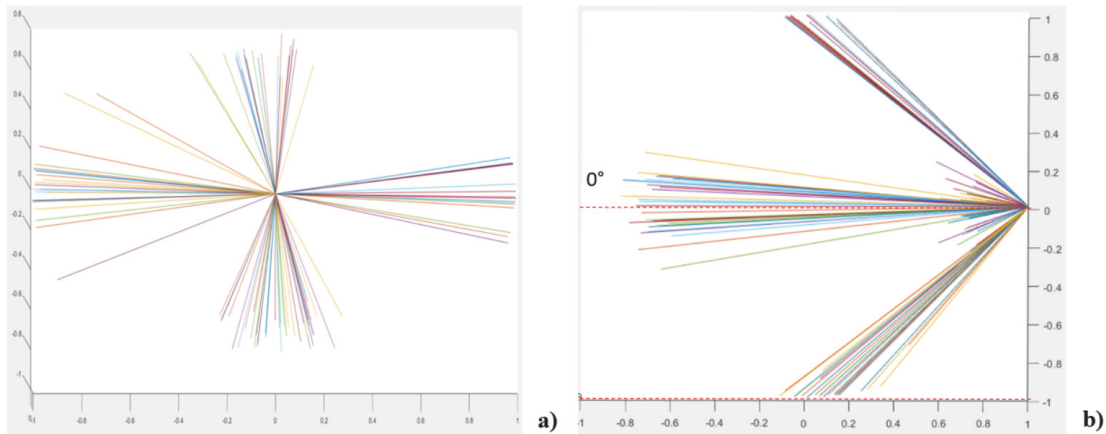


FIGURE 5.12 – Distribution des orientations cristallographiques (répartition des différents vecteurs c_1 projetés dans les plans $(X_2; X_3)$ (a) et $(X_1; X_3)$ (b) des grains les plus chargés des agrégats de 316L à distribution d'OC aléatoire. Les couleurs associées à chaque orientation sont attribuées de manière aléatoire

Il est visible que l'ensemble des grains les plus chargés pour des distributions d'OC aléatoire ont une OC préférentielle (la présence de 4 groupements sur la figure 5.12 étant due aux symétries), qui englobe l'orientation critique où c_1 est colinéaire aux trissectrices. Néanmoins, cette orientation critique semble ici malgré tout influencée par la morphologie qui peut générer une variation de l'angle cristallographique préférentiel dépassant les 10° . Pour la suite, l'étude s'est alors concentrée sur les voisinages "*fortement nuisibles*" (tels que définis plus haut) en tentant de faire émerger des caractéristiques communes à l'origine de leur forte influence.

On rappelle que l'ensemble des agrégats est généré dans un domaine cubique de 1mm de côté. La distance inter-centroïde moyenne est définie comme étant deux fois le rayon sphérique associé au volume moyen. Pour le dire autrement, lorsque le grain est assimilé en première approximation à une sphère et que tous les grains sont supposés avoir le volume moyen, la distance moyenne correspond à la distance inter-centroïde de deux sphères contiguës. La distance entre le centroïde des grains "*fortement influençables*" et celui de leurs plus proches voisins est significativement plus faible que la moyenne dans l'agrégat (0.069 mm contre 0.147 mm en moyenne, soit près de 53% plus faible) - et est fortement variable d'un grain à l'autre. Cette proximité entre le grain et ses premiers voisins assure une influence bien plus importante de ceux-ci et donc un écart beaucoup plus important à la théorie d'Eshelby.

On peut de même noter que tous les grains composant ces voisinages sont plus rigides (jusqu'à 42% de plus que le module d'Young du milieu effectif isotrope) que le milieu effectif dans la direction de chargement. Ainsi les voisinages "*fortement nuisibles*" semblent être - pour des configurations d'agrégat de 316L en déformation uniaxiale tout du moins - des régions fortement rigides enserrant un grain et augmentant ainsi fortement sa contrainte. Par contre, comme précédemment aucune texture morphologique n'apparaît, même localement, la distribution des orientations spatiales étant quelconque.

A noter toutefois que le taux d'*Oblates* moyen dans le cumul des différents voisinages desdits grains est similaire au taux moyen observé dans les différents agrégats (26%). La forme *Oblate* n'est donc pas spécialement favorisée par les voisinages "*fortement nuisibles*". A propos du nombre de voisins et du volume pour les grains les plus chargés "*fortement influençables*", aucune caractéristique singulière n'émerge par rapport aux moyennes constatées dans l'agrégat. Le volume moyen des grains constituant les différents voisinages est par ailleurs égal au volume moyen des grains constituant les agrégats. Enfin, les voisinages possèdent en moyenne un rapport de forme proche du rapport de forme moyen dans les agrégats (1.94 *vs* 1.90).

5.4.2 Distribution d'OC aléatoire en glissement simple

La distribution des valeurs moyennes et maximales de contrainte équivalente de von Mises dans les agrégats de 600 grains - les mêmes que ceux de la sous-section 5.4.1, mais chargés en glissement simple - est présentée figure 5.10 ci-dessous, qui organisée de la même manière que la figure 5.9.

Les moyennes sont faiblement dispersées pour les différentes distributions d'OC aléatoires des différents agrégats. Les maximums semblent assez éparpillés, comme dans la sous-section précédente. Ils sont en moyenne 30% plus importants que les contraintes moyennes, lesquelles sont centrées autour de 150 MPa environ. Pour mettre en lumière l'influence du voisinage sur les grains les plus chargés, le niveau de contrainte dans ceux-ci est comparé figure 5.14 ci-dessous, au cas où le voisinage n'est pas pris en compte.

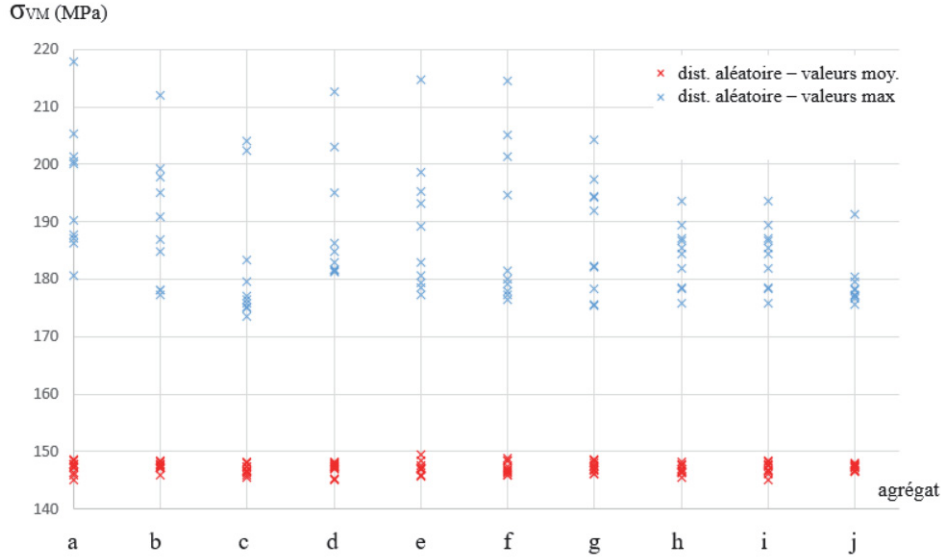


FIGURE 5.13 – Répartition des contraintes de von Mises moyennes (en rouge) et maximales (en bleu) dans les différents agrégats de 316L chargés en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ pour les distributions d'OC aléatoires

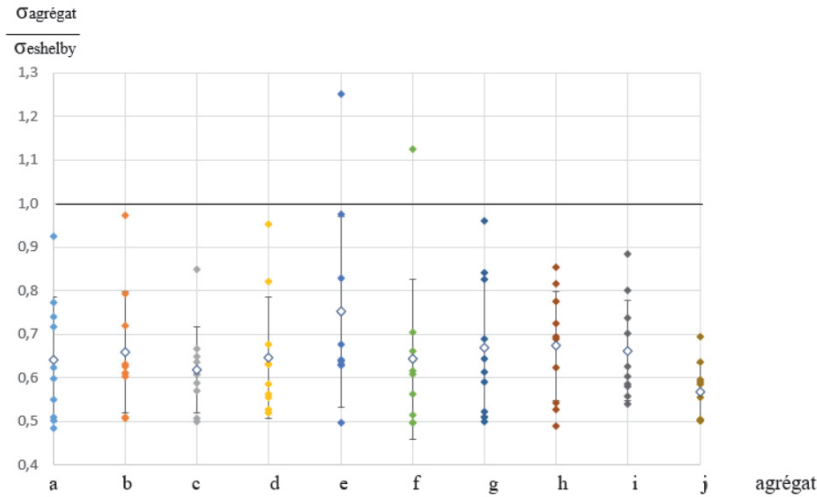


FIGURE 5.14 – Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (aléatoires ici) sont représentées. Chargement en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$

Il faut noter que la très grande majorité des voisinages (à deux exceptions près à 1.24 et 1.12 respectivement, voir plus loin) a ici un effet bénéfique sur les grains les plus chargés, en ce sens qu'ils diminuent la contrainte subie (ratio de contrainte inférieur à 1). Le ratio de contrainte évolue entre 0.48 et 1.25 avec une moyenne sur l'ensemble des valeurs de (0.65 ± 0.14) . Lorsque le ratio de contrainte est égal ou inférieur à 0.5 les grains concernés sont qualifiés de "*fortement influençables*" (et les voisinages associés de "*fortement bénéfiques*"). Si toutes les distributions pour un agrégat donné sont au dessus de 0.5, le grain avec le ratio le plus faible parmi les 10 distributions considérées d'un agrégat donné est également qualifié de "*fortement influençables*" (et les voisinages associés de "*fortement bénéfiques*").

Si l'étude de ce chapitre vise à mieux comprendre les voisinages à l'origine d'une augmentation de la contrainte, elle peut également s'enrichir d'éléments expliquant le phénomène inverse. Les voisinages fortement bénéfiques vont donc être aussi étudiés ci-après.

Les deux grains possédant un voisinage nuisible (ratio de contrainte supérieur à 1, tableaux 5.3 et 5.4 et figures 5.15 et 5.16), ainsi que le voisinage le plus "*fortement bénéfique*" (tableau 5.5 et figure 5.17) vont donc être détaillés ci-dessous.

grain n°	distance au grain <i>A</i> (en mm)	forme	k	pos. relative			Ori. spatiale			volume (en mm ³)
				X_1	X_2	X_3	ψ	θ	φ	
-	0.147	-	1.9	-	-	-	-	-	-	0.0016
205	-	Ob.	3.32	-	-	-	41°	10°	-56°	0.0006
420	0.057	Pro.	2.29	-0.032	-0.024	0.041	57°	78°	-74°	0.0011
30	0.079	Ob.	2.85	0.008	0.041	0.068	-78°	37°	11°	0.0013
360	0.100	Pro.	1.79	-0.055	0.079	-0.027	-2°	45°	74°	0.0002
468	0.110	Ob.	1.76	0.036	-0.102	0.025	73°	79°	27°	0.0022
474	0.121	Pro.	1.65	-0.115	-0.010	-0.036	-10°	56°	48°	0.0014

TABLE 5.3 – Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain *A* (première des deux exceptions, $\sigma_{agregat}/\sigma_{Eshelby} = 1.24$, agrégat (e) figure 5.14) au voisinage nuisible (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)

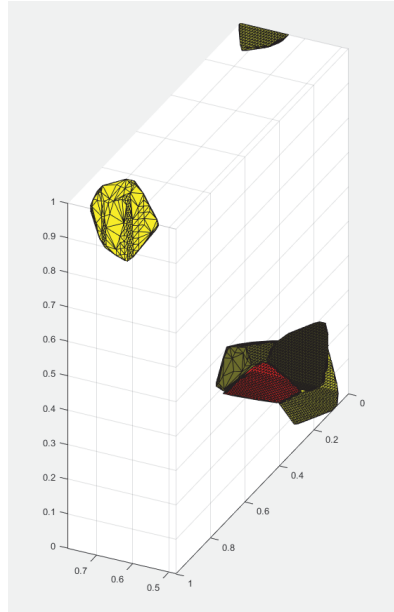


FIGURE 5.15 – grain *A* (n°205, en rouge) et ses cinq premiers voisins (n°420, 30, 360, 468, 474, par dégradés successifs de jaune) affichés sous leur forme polyédrique initiale. Le voisinage est ici nuisible (première des deux exceptions, $\sigma_{agregat}/\sigma_{Eshelby} = 1.24$, agrégat (e) figure 5.14)

Le premier des deux grains au voisinage nuisible de la figure 5.14 possède de large faces quasi-planes inclinées (en rouge, figure 5.15), contre lesquelles viennent se poser ses premiers voisins. Un des voisins est situé en diagonale de lui, mettant une arête vive (et donc une concentration de contraintes) sur le segment reliant les deux centroïdes tandis qu'un

autre grain est voisin contre sa face plane du fait des conditions périodiques, ce qui là encore favorise un différentiel de déformation important et peu réaliste. De ce fait, ce grain critique est rapidement recouvert et est d'autant plus sensible au voisinage que beaucoup de ses voisins sont plus gros que lui (tableau 5.3 et figure 5.15). Enfin le caractère frontalier du grain et de ses voisins accentue les concentrations de contraintes.

grain n°	distance au grain A (en mm)	forme	k	pos. relative			Ori. spatiale			volume (en mm ³)
				X_1	X_2	X_3	ψ	θ	φ	
-	0.147	-	1.9	-	-	-	-	-	-	0.0016
574	-	Ob.	1.54	-	-	-	79°	117°	34°	0.0010
561	0.037	Pro.	1.49	-0.015	-0.029	0.016	18°	105°	-33°	0.0009
196	0.079	Pro.	1.64	0.035	0.056	-0.043	73°	54°	-52°	0.0011
57	0.083	Pro.	1.47	0.046	-0.066	-0.024	29°	73°	-36°	0.0009
374	0.102	Ob.	2.82	0.073	0.069	-0.015	33°	56°	42°	0.0008
526	0.132	Pro.	1.47	-0.073	0.109	-0.013	46°	71°	-76°	0.0017

TABLE 5.4 – Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du deuxième grain A au voisinage nuisible (en rouge, deuxième des deux exceptions, $\sigma_{agregat}/\sigma_{Eshelby} = 1.12$, agrégat (f) figure 5.14) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)

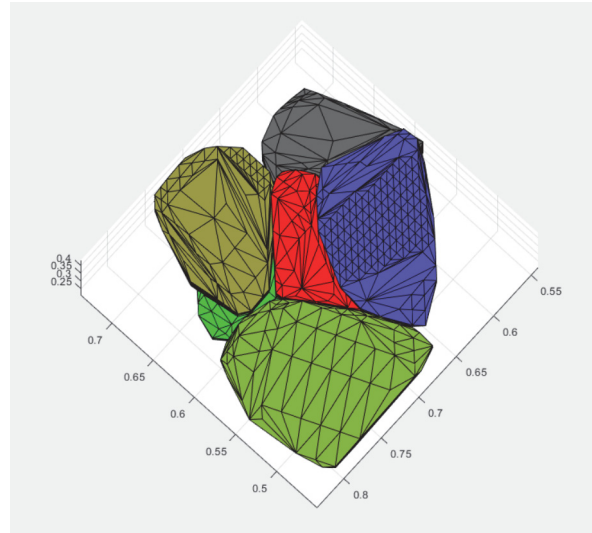


FIGURE 5.16 – grain A (n°574, en rouge) et ses cinq premiers voisins (n°561, 196, 57, 374, 526, par dégradés successifs de jaune) affichés sous leur forme polyédrique initiale. Le voisinage est ici nuisible (deuxième des deux exceptions, $\sigma_{agregat}/\sigma_{Eshelby} = 1.12$, agrégat (f) figure 5.14)

Malgré un volume et une acuité géométrique comparable à celle de ses voisins immédiats, le grain critique (en rouge, figure 5.16) possède une forme très aplatie sur deux faces quasiment parallèles. De ce fait, les voisins bleu (n°561) et brun (n°374) ont donc leur centroïdes très proches et exercent une influence importante (ici nuisible) sur le grain rouge (n°574).

grain n°	distance au grain A (en mm)	forme	k	pos. relative			Ori. spatiale			volume (en mm ³)
				X ₁	X ₂	X ₃	ψ	θ	φ	
-	0.147	-	1.9	-	-	-	-	-	-	0.0016
507	-	Ob.	20.97	-	-	-	-50°	14°	27°	0.0006
302	0.045	Pro.	1.6	0.012	0.023	0.037	76°	37°	9°	0.0005
80	0.139	Pro.	1.85	-0.006	-0.115	0.078	9°	68°	5°	0.0018
566	0.163	Pro.	1.59	-0.156	0.036	0.031	15°	46°	66°	0.0014
469	0.176	Pro.	1.66	-0.11	-0.137	-0.006	63°	34°	70°	0.0014

TABLE 5.5 – Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain critique (au voisinage le plus *fortement bénéfique*) (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)

Le caractère frontalier du grain critique (en rouge, figure 5.17) - il est quasiment situé à un coin de l'agrégat - est à l'origine d'une forte troncature du polyèdre d'origine, ainsi que de celui de ses voisins immédiats, ce qui est à l'origine de concentrations de contraintes menant à un accroissement de l'effet de voisinage dans ce grain. De fait, le caractère bénéfique du voisinage ici est donc avant tout dû à une morphologie particulière et peu réaliste.

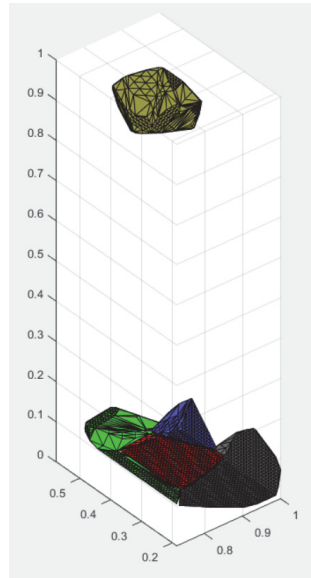


FIGURE 5.17 – grain A (n°507, en rouge) et ses quatre voisins (n°302, 80, 566, 469, par dégradés successifs de jaune) affichés sous leur forme polyédrique initiale. Ici, le voisinage est le plus fortement bénéfique parmi les grains les plus chargés en glissement simple (pour des distributions d'OC aléatoires)

Pour résumer : le taux d'*Oblates* est très supérieur au taux moyen d'*Oblates* dans les agrégats (64% contre 26%) ce qui montre une très forte surreprésentation de cette forme dans les grains les plus chargés. Le rapport de forme moyen des grains les plus chargés, comme la moyenne des 10 rapport de forme maximal dans chaque agrégat sont très supérieurs au rapport de forme moyen constaté dans les agrégats (respectivement 3.93 et 9.58 *vs* 1.9). Une morphologie fortement sphéroïdale semble donc favoriser l'apparition du maximum de contrainte. Aucune tendance n'apparaît sur les orientations spatiale et cristallines (voir figure 5.18) des grains les plus chargés.

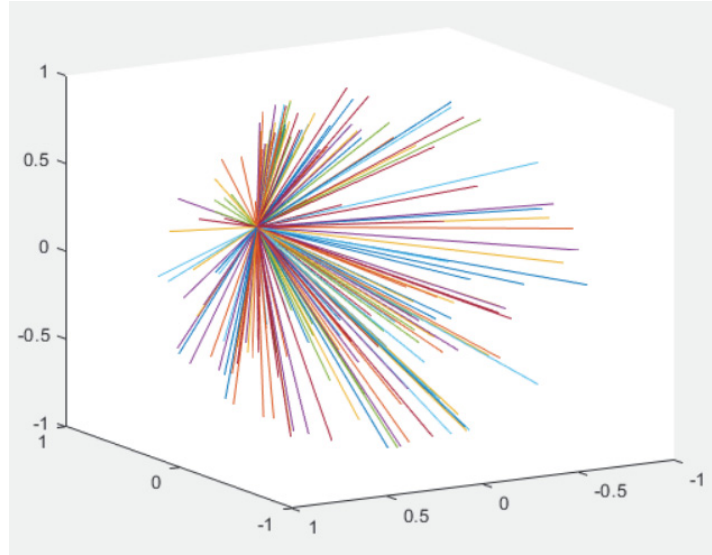


FIGURE 5.18 – Distribution des orientations cristallographiques (répartition des différents vecteurs c_1 dans l'espace) des grains les plus chargés des agrégats de 316L en glissement simple pour les distributions d'OC aléatoires. Les couleurs associées à chaque orientation sont attribuées de manière aléatoire

Pour du 316L en glissement simple, la théorie d'Eshelby surestime souvent, parfois fortement, la contrainte dans les grains. En effet l'écart entre la contrainte équivalente de von Mises mesurée au centroïde du grain le plus chargé dans l'agrégat, et la contrainte de von Mises interne à l'inhomogénéité pour le même sphéroïde noyé dans un milieu infini doté des propriétés du milieu effectif est quasiment systématiquement négatif. Toutefois dans quelques rares cas, on peut constater une sous-évaluation de la contrainte (2% des cas pour les distributions strictement aléatoires).

Il semble donc que la distribution d'orientations cristallines joue un rôle moindre dans la détermination des maximums locaux : certains grains sont en effet identifiés comme les plus chargés de leurs agrégats pour plusieurs orientations cristallines différentes, ce qui montre la prééminence de la morphologie sur l'orientation cristallographique dans le cas d'un chargement externe de glissement simple.

On se concentre désormais plus particulièrement sur les voisinages "*fortement bénéfiques*" : quelles paramètres partagent-ils et peuvent aider à leur identification ?

Les différents grains les plus chargés *fortement influencés* par un voisinage *fortement bénéfique* sont représentés par numéro et agrégat d'appartenance croissant. La figure 5.19 a été réalisée pour illustrer le principal point commun des voisinages "*fortement influents*" (bénéfiques comme néfastes), à savoir la grande proximité des premiers voisins des grains fortement influencés. Si l'ensemble des grains composant les voisinages "*fortement bénéfiques*" a été pris en compte, il a été choisi de n'illustrer le propos qu'avec les trois plus proches voisins afin de conserver une certaine lisibilité. On rappelle par ailleurs que l'ensemble des agrégats est généré dans un domaine cubique de 1mm de côté. La distance inter-centroïde moyenne est définie comme dans la sous-section 5.4.1.

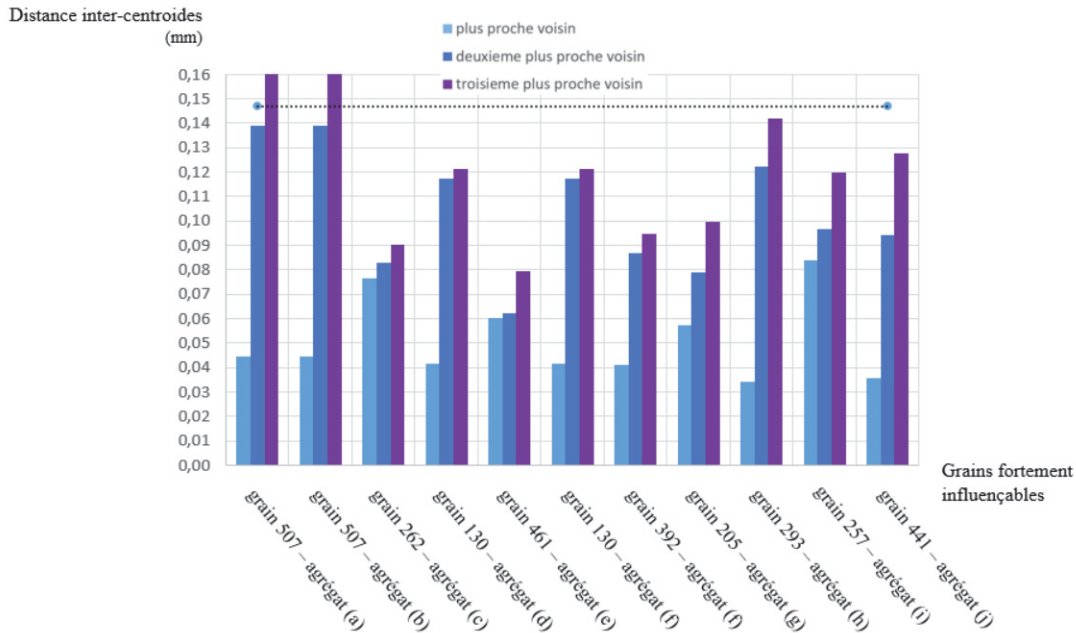


FIGURE 5.19 – Histogramme présentant les distances inter-centroïdes entre chacun des grains "*fortement influençables*" (agrégats de 316L en glissement simple - distributions aléatoire) et leurs trois premiers voisins. En pointillés, la distance inter-centroïdes moyenne dans l'agrégat

On remarque que la distance entre le centroïde des grains "*fortement influençables*" et celui de leurs plus proches voisins est significativement plus faible que la moyenne dans l'agrégat - et fortement variable d'un grain à l'autre - (0.051 contre 0.147mm, soit près de 65% plus faible). Cette proximité concerne aussi les seconds et troisièmes voisins, avec certes un écart plus faible (29.8% et 18.3% respectivement par rapport à la distance intercentroïde moyenne). Comme pour les agrégats chargés en déformation uniaxiale, la proximité entre le grain et ses premiers voisins assure une influence plus importante de ceux-ci et peut donc être à l'origine des écarts à Eshelby.

Concernant les grains où l'on observe que la théorie d'Eshelby sous-estime la contrainte relevée : l'augmentation de contrainte est assez importante (+12.55% et +24.96%) mais il est difficile de conclure au vu du faible nombre de cas observés. Il est à noter toutefois que certains grains apparaissent plusieurs fois malgré des orientations cristallographiques différentes ce qui semble indiquer que la morphologie tient ici aussi un rôle important.

5.4.3 "Optimisation" d'un voisinage donné

Considérons le grain *A* n°492 de la microstructure (d) et son voisinage, dont les cinq premiers voisins ont été détaillés dans le tableau 5.2 et figure 5.11 (sous-section 5.4.1). En déformation uniaxiale, on sait que ce voisinage a eu une influence importante et néfaste sur le grain *A*. De plus, il ne possède pas de grains frontaliers susceptibles de créer des concentrations de contraintes aussi importantes que dénuées de réalité physique. [Bretin, 2020] a défini des conditions permettant - dans un agrégat régulier et avec une banque d'OC limitée - de maximiser l'effet des voisins. Les questions à laquelle veut répondre cette sous-section sont donc : à quel point l'influence du voisinage est accrue lorsque les conditions de Bretin sont appliquées ? Quelle contrainte supplémentaire par rapport aux résultats de Bretin, la morphologie va-t-elle générer ?

Pour répondre à ces questions, on considère que le voisinage est toujours constitué de 316L, et que l'ensemble est toujours soumis à une déformation uniaxiale, ce chargement étant plus simple à appréhender car ayant un vecteur d'effort bien défini - ce qui aura son importance lorsqu'il s'agira "d'optimiser" la position relative des différents voisins. Dans un souci de simplification et de lisibilité des résultats, seuls les cinq premiers voisins du voisinage, déjà présentés tableau 5.2 (les plus proches du grain influencé et donc les plus influents) seront étudiés.

grain voisin n°	Module d'Young projeté suivant X_3 (en GPa)	écart relatif avec la rigidité maximale (en %)
103	243	23.7%
312	254	17.7%
410	101	99.6%
134	246	21.9%
101	112	93.6%

TABLE 5.6 – Projection pour un chargement de déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ des modules d'Young suivant X_3 des cinq premiers voisins et écart relatif par rapport à la rigidité projetée maximale

grain voisin n°	Module d'Young projeté suivant X_1 (en GPa)	écart relatif avec la rigidité maximale (en %)
103	285	1.1%
312	269	9.4%
410	243	23.3%
134	279	4.3%
101	114	92.5%

TABLE 5.7 – Projection pour un chargement de déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{11}^0 = 0.001$ des modules d'Young suivant X_1 des cinq premiers voisins et écart relatif par rapport à la rigidité projetée maximale

Pour commencer, il convient de caractériser l'orientation cristallographique de chaque grain. Pour ce faire, le module d'Young de chaque voisin va être projeté dans la direction du chargement (c'est-à-dire selon X_3 puis X_1 , voir tableaux 5.6 et 5.7), à l'aide de l'équation 3.24 (voir sous-section 3.5.1, chapitre 3). Cette méthode permet - grâce à la nature CFC de la maille de 316L - de visualiser plus facilement l'orientation cristalline des différents voisins et les écarts des OC des voisins vis-à-vis de l'OC la plus critique.

D'après [Bretin, 2020] l'orientation cristallographique du grain d'intérêt n'a aucune influence sur l'effet de voisinage (voir sous-section 2.3.1, chapitre 2). De ce fait, celui-ci devrait être maximisé si chaque voisin possède l'OC la plus critique.

Comparons donc l'effet du voisinage du grain n°492 "à l'état naturel" avec l'effet induit lorsque ses cinq premiers voisins (les plus influents) sont tous pourvus de l'OC $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$ (leurs autres caractéristiques, morphologiques et positions relatives sont identiques) pour une déformation uniaxiale suivant X_3 , puis d'une OC $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$ pour une déformation selon X_1 , ces OC étant censées maximiser la rigidité dans ces 2 directions de chargement :

grain voisin n°	différentiel de contrainte au centroïde de A (en MPa, OC initiale)	différentiel de contrainte au centroïde de A (en MPa) (OC = $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$)	contrainte uniforme à l'infini (en MPa)
103	37.27	33.15	153.4
312	9.61	25.22	
410	-47.18	24.85	
134	0	21.14	
101	-17.42	22.14	

TABLE 5.8 – Effet des cinq premiers voisins au point correspondant au centroïde du grain A avec leurs OC initiales et avec les OC à $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$, pour un chargement en déformation uniaxiale suivant X_3 telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$

grain voisin n°	différentiel de contrainte au centroïde de A (en MPa, OC initiale)	différentiel de contrainte au centroïde de A (en MPa) (OC = $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$)	contrainte uniforme à l'infini (en MPa)
103	27.52	22.83	153.4
312	6.49	22.80	
410	9.63	26.95	
134	6.21	27.55	
101	1.25	27.39	

TABLE 5.9 – Effet des cinq premiers voisins au point correspondant au centroïde du grain A avec leurs OC initiales et avec les OC à $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$, pour un chargement en déformation uniaxiale suivant X_1 telle que $\varepsilon_{11}^0 = 0.001$

A l'exception du grain n°103 que l'on va traiter au paragraphe suivant, tous les voisins (tableaux 5.8 et 5.9) génèrent un différentiel de contrainte (la contrainte - de von Mises au centroïde du grain A ôtée de la contrainte correspondant à l'état de contrainte uniforme généré par la déformation uniaxiale) plus important lorsqu'ils sont pourvu d'une OC critique⁷, ce qui est en accord avec les résultats de [Bretin, 2020].

Une nuance toutefois doit être apportée car le grain n°103 - le plus proche et le plus influent voisin du grain A - a un effet légèrement plus important sur le point correspondant au centroïde du grain A lorsqu'il possède son OC d'origine. Il faut noter toutefois que cette OC génère déjà un module d'Young important. L'influence que pouvait jouer l'orientation cristalline sur l'influence de ce voisin sur le grain A était donc de toute manière limitée. D'autre part, il faut noter que le rapport de forme du sphéroïde approximant le grain n°103 est très élevé ($k = 8.48$). Ces deux données laissent entendre qu'une forte acuité géométrique du grain pourrait interférer avec son orientation cristallographique et donc que la morphologie pourrait influencer dans une certaine mesure sur la criticité de l'OC. Cette hypothèse aurait par ailleurs le mérite de justifier la dispersion des OC des grains les plus chargés figure 5.12.

L'autre grand résultat de [Bretin, 2020] est la détermination du positionnement optimal des voisins pour maximiser leur effet sur le grain influencé A . En l'occurrence, pour un chargement uniaxial suivant X_3 , si le voisin et le grain A ont leurs centroïdes alignés suivant un axe colinéaire à X_3 , avec le voisin "en-dessous", alors son effet sur le grain A sera maximal. Afin de savoir si ce résultat de Bretin est toujours valable dans un agrégat avec des morphologies quelconques, un nouvel essai "d'optimisation de l'effet du voisinage"

7. *i.e.* $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$ si le chargement est suivant X_3 et $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$ si le chargement est suivant X_1

va être mené : chaque voisin conservera sa morphologie, son OC "naturelle" mais l'effet qu'il exerce sur le grain A sera comparé à l'effet qu'il exercerait s'il était placé "sous" le grain influencé de telle sorte que leurs centroïdes seraient colinéaires à l'axe X_3 .

Lorsque le tableau 5.10 (respectivement 5.11) où chaque voisin est positionné de manière "optimale" selon [Bretin, 2020] est comparé avec le tableau 5.8 (respectivement 5.9) où les mêmes voisins sont à leur position relative initiale par rapport au grain A , il est visible que la position relative des voisins n'a qu'un effet négligeable sur l'influence que ceux-ci exercent sur le grain A (moins de 3 MPa de différentiel de contrainte supplémentaire). Il faut toutefois noter qu'à l'exception du grain n°103, les rapports de forme des voisins sont tous extrêmement limités, leur approximation sphéroïdale est donc proche de la forme sphérique ce qui limite l'influence de leur orientation spatiale.

grain voisin n°	différentiel de contrainte au centroïde de A (en MPa) (OC initiale)	différentiel de contrainte au centroïde de A (en MPa) (OC = $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$)
103	38.67	34.15
312	9.56	25.21
410	-44.44	24.9
134	-0.52	21.26
101	-17.54	22.06

TABLE 5.10 – Effet des cinq premiers voisins au point correspondant au centroïde du grain A avec leurs OC initiales et avec les OC à $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$ lorsqu'ils sont avec la position relative "optimale", pour un chargement en déformation uniaxiale suivant X_3 telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$

grain voisin n°	différentiel de contrainte au centroïde de A (en MPa) (OC initiale)	différentiel de contrainte au centroïde de A (en MPa) (OC = $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$)
103	27.53	22.84
312	6.42	22.80
410	9.86	27.42
134	5.96	27.80
101	0.98	27.37

TABLE 5.11 – Effet des cinq premiers voisins au point correspondant au centroïde du grain A avec leurs OC initiales et avec les OC à $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$ lorsqu'ils sont avec la position relative "optimale", pour un chargement en déformation uniaxiale suivant X_1 telle que $\varepsilon_{11}^0 = 0.001$

Penchons nous un instant de nouveau sur le grain n°103 : c'est à la fois, le voisin le plus influent, le plus proche du grain influencé et celui dont le rapport de forme est le plus élevé ($k = 8.48$). Il faut noter qu'un de ses deux demi-grands axes est quasiment colinéaire (déviations angulaires de 12°) avec la droite reliant les centroïdes des grains n°103 et 492 comme l'illustre la figure 5.20. Pour le dire autrement : le grain influencé se trouve sur plan dessiné par la "tranche" de l'*Oblate*, là où son influence est la plus forte.

Le fait que le grain n°103 soit pour ainsi dire "directement pointé" sur le grain n°492 qu'il influence explique d'une part que son influence soit aussi grande, mais également d'autre part que la position relative "critique" définie par [Bretin, 2020] diminue le différentiel de contrainte généré par le grain voisin n°103 : en positionnant le voisin "sous" le grain influencé sans modifier son orientation spatiale, ce dernier n'est plus dans le plan dessiné par les demi-grand axes de l'*Oblate* approximant le grain n°103 qui devient alors nettement moins influent.

Enfin, il faut noter un résultat surprenant mais néanmoins important : lorsque l'agrégat complet est soumis au chargement de déformation uniaxiale (selon X_3 ou X_1), la contrainte dans le grain A (n°492 pour le voisinage étudié) évolue de manière négligeable (moins de 0.001 MPa d'augmentation de la contrainte) lorsque les grains identifiés comme les voisins du n°492 se voient tous attribuer l'OC $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$ (pour un chargement selon X_3 , $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$ pour un chargement selon X_1). Il est possible que le voisinage de ce grain en particulier ait été trop peu nombreux (9 voisins identifiés pour un agrégat de 600 grains). Il est aussi possible que le changement d'OC des voisins ait entraîné une réaction en chaîne, modifiant l'effet exercé par leur propre voisinage... toutefois cette théorie va contre la première hypothèse de Bretin qui énonce clairement que l'effet du voisinage est indépendant de l'OC du grain influencé. L'explication la plus probable est que l'attribution de la même OC à tout un voisinage - entraînant *de facto* la création d'une macrozone localisée - a mis à mal l'hypothèse d'un milieu effectif isotrope et ait faussé les résultats.

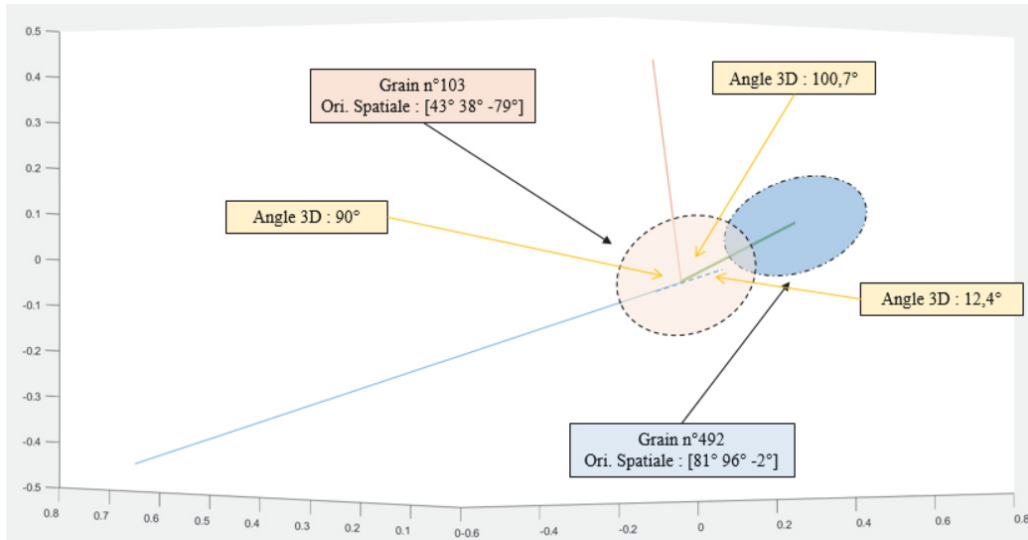


FIGURE 5.20 – Représentation spatiale des demi-grands axes du sphéroïde *Oblate* aplati approximant la forme du grain n°103 (en orange semi-transparent) et la droite reliant le centroïde du grain n°103 au centroïde du grain n°492 (en bleu semi-transparent, avec son orientation spatiale associée) qu'il influence. Les tailles et distances ne sont pas à l'échelle

Dans cette hypothèse, l'outil GNOME ne pourrait alors pas prendre en compte l'effet généré par tout un voisinage doté de la même OC et donnerait un effet de voisinage identique à celui généré par des voisins doté d'OC aléatoires. L'implémentation d'un module EIM-Anisotrope permettant au GNOME de travailler dans un milieu effectif anisotrope et le codage d'un module Propriétés-Effectives permettant de calculer les propriétés mécaniques du milieu effectif "réel" et non d'un milieu effectif "idéal" permettrait de lever l'incertitude autour de ce résultat (voir chapitre 6).

5.5 Etude du Titane

5.5.1 Distribution d'OC aléatoire *vs* Distribution de Burgers en déformation uniaxiale

La distribution des valeurs moyennes et maximale de contrainte équivalente de von Mises dans les agrégats de 600 grains - à nouveau chargés en déformation uniaxiale mais avec les propriétés matériau du Titane - est présentée figure 5.21 ci-dessous. Elle est organisée de la même manière que les figures 5.9 et 5.13 mais avec en plus et en décalé de chaque colonne, 20 points rouge et bleus en croix verticales (+) figurant respectivement les valeurs moyennes et maximales obtenues pour les 10 distributions obéissant aux relations de Burgers associées à chaque agrégat.

On note la faible (voire très faible dans le cas des distributions aléatoires) dispersion des moyennes pour les différentes distributions des différents agrégats. La différence totale entre le minimum et le maximum ne dépasse pas 5.3% de la moyenne pour les distributions strictement aléatoires, et 11% de la moyenne pour les distributions de Burgers. Les écart-types sont également très faibles pour toutes les valeurs. Il y a donc peu d'effets - quels qu'ils soient - visibles sur ces agrégats.

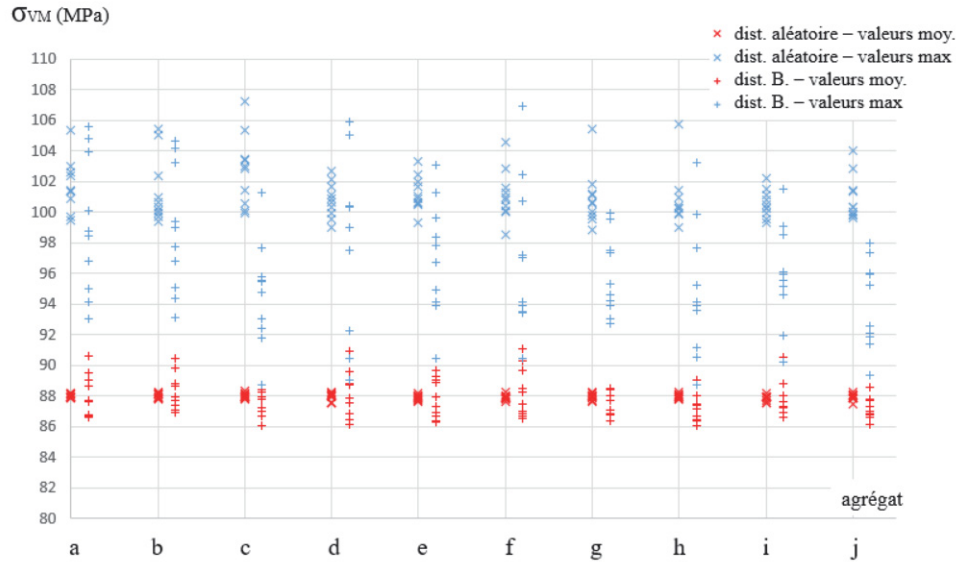


FIGURE 5.21 – Répartition des contraintes de von Mises moyennes (en rouge) et maximales (en bleu) dans les différents agrégats de Titane α chargé en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ pour les distributions d'OC aléatoires (\times) et de Burgers (+) associées

Il semble donc que l'élasticité anisotrope du Titane soit trop faible pour que l'effet du voisinage soit présent de manière notable - à tout le moins en déformation uniaxiale. Concernant les maximums de contrainte, ils sont en moyenne 20% supérieurs aux contraintes moyennes, avec une dispersion faible dans le cas des distributions aléatoires et un peu plus élevée pour les distributions de Burgers, ce qui est normale car elles comportent moins d'OC. Concernant l'influence du voisinage sur ces grains les plus chargés, le niveau de contrainte de ces derniers va être comparé avec et sans voisins figure 5.22 ci-dessous.

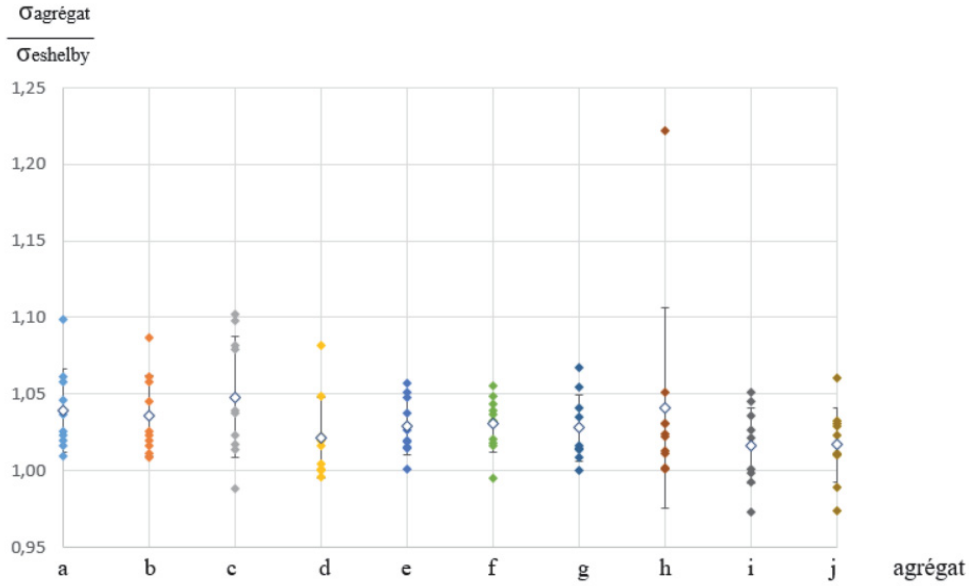


FIGURE 5.22 – Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (aléatoires ici) sont représentées. Chargement en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$

Le ratio de contrainte équivalente de von Mises varie ici entre 0.97 et 1.1 pour les différentes distributions des différents agrégats. La moyenne de l'ensemble des valeurs et son écart-type sont de (1.03 ± 0.3) . Le ratio est donc peu élevé et la dispersion des valeurs est faible. Les voisinages sont donc tous ici "*faiblement influents*" à une exception près : un grain possède un ratio à 1.22. Son voisinage est constitué de 16 voisins, soit un nombre à peine supérieur à la moyenne des grains dans les différents agrégats (14.87). Par contre ses trois premiers voisins sont situés plus près du grain que la moyenne, comme détaillé dans le tableau 5.12 ci-après.

grain n°	distance au grain A (en mm)	forme	k	pos. relative			Ori. spatiale			volume (en mm ³)
				X_1	X_2	X_3	ψ	θ	φ	
-	0.147	-	1.9	-	-	-	-	-	-	0.0016
293	-	Ob.	14.31	-	-	-	-24°	41°	14°	0.0021
397	0.034	Ob.	2.74	0.014	0.019	0.025	-46°	56°	50°	0.0015
546	0.122	Pro.	1.73	-0.054	-0.091	-0.061	-5°	75°	31°	0.0026
39	0.142	Pro.	1.46	-0.06	0.07	-0.11	75°	25°	-66°	0.0016

TABLE 5.12 – Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain critique A (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)

On peut remarquer que le grain critique de la figure 5.22 (en rouge figure 5.23) est un *Oblate* extrêmement aplati et son premier voisin (en jaune) est aussi un *Oblate*, très proche (distance intercentroïde de 0.034 mm *vs* distance intercentroïde moyenne de 0.147 mm) et posé contre la face quasi-plane du premier, ce qui laisse augurer d'une forte influence de ce premier voisin, comme visible sur la figure 5.23a.

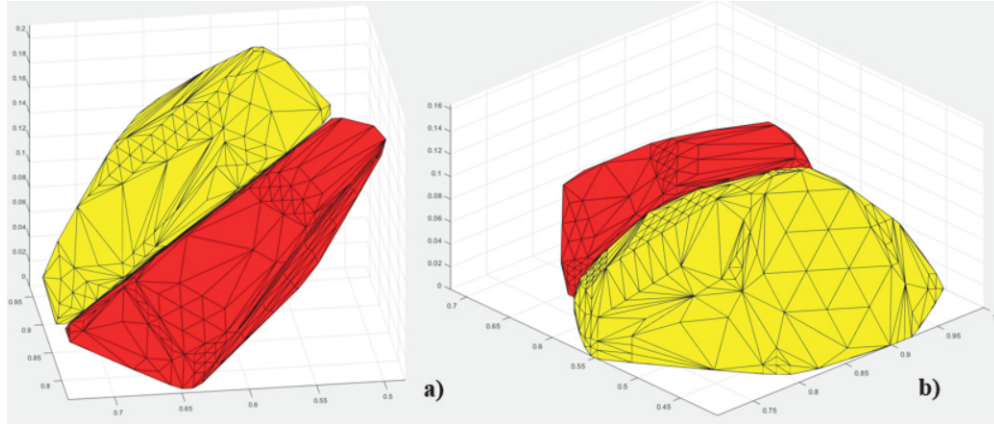


FIGURE 5.23 – grain A (n°293, en rouge) et son premier voisin (n°397, en jaune) (a) grain A (n°293, en rouge) et son deuxième voisin (n°546, en jaune) (b) affichés sous leur forme polyédrique initiale. A noter que les échelles sont différentes entre les deux figures

On peut également remarquer que le grain critique de la figure 5.22 et son deuxième voisin sont également très proches (distance intercentroïde de 0.122mm *vs* distance intercentroïde moyenne de 0.147mm) et que ce dernier (en jaune, figure 5.23b) possède un volume important, ce qui laisse aussi augurer d’une forte influence de ce deuxième voisin.

La même étude que celle montrée figure 5.22 est réalisée dans les mêmes conditions mais avec les distributions de Burgers, ce qui aboutit au graphe 5.24 ci-dessous.

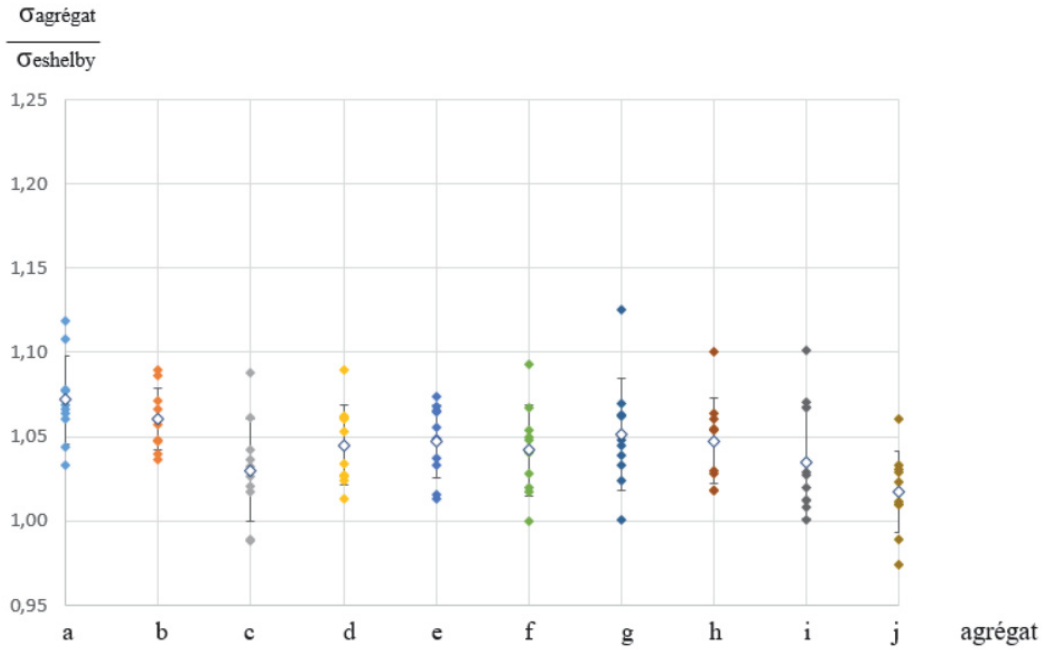


FIGURE 5.24 – Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (de Burgers ici) sont représentées. Chargement en déformation uniaxiale tel que $\epsilon_{33} = 0.001$

Lorsqu'on étudie les grains les plus chargés avec et sans voisinage pour des distributions d'OC obéissant aux relations de Burgers on observe que, le ratio de contrainte équivalente de von Mises varie entre 0.97 et 1.12 pour les différentes distributions des différents agrégats. La moyenne et son écart-type sont de (1.04 ± 0.3) . Le ratio est donc peu élevé là aussi et la dispersion des valeurs est faible. Les voisinage sont donc tous ici "*faiblement influents*", sans exception cette fois.

Si les ratios de contrainte avec et sans voisins n'atteignent pas des valeurs aussi élevées que pour le 316L - preuve d'un effet de voisinage plus faible - il reste néanmoins possible de faire quelques observations sur les grains les plus chargés : parmi ces derniers, beaucoup sont des *Oblates* (49% des grains les plus chargés pour les distributions d'OC aléatoires, 65% des grains les plus chargés pour les distributions d'OC de Burgers contre 26% en moyenne dans les agrégats). Le rapport de forme semble également plus élevé que la moyenne pour ces grains les plus chargés (respectivement 3.14 et 3.56 pour les distributions aléatoires et de Burgers *vs* 1.92 en moyenne dans les agrégats) avec présence de maximums parfois très élevés ($k = 14.31$, voir figure 5.23) ce qui accentue le rôle de la morphologie dans l'émergence de grains chargés.

Contrairement au 316L qui bénéficie de la symétrie cubique, la maille du Titane α est à symétrie hexagonale ce qui complexifie l'identification des orientations comparables. Aucune tendance nette ne semble émerger des données rassemblées tant pour les distributions d'OC aléatoires que pour les distributions de Burgers, pour les grains les plus chargés (figure 5.25) que pour leurs voisinages.

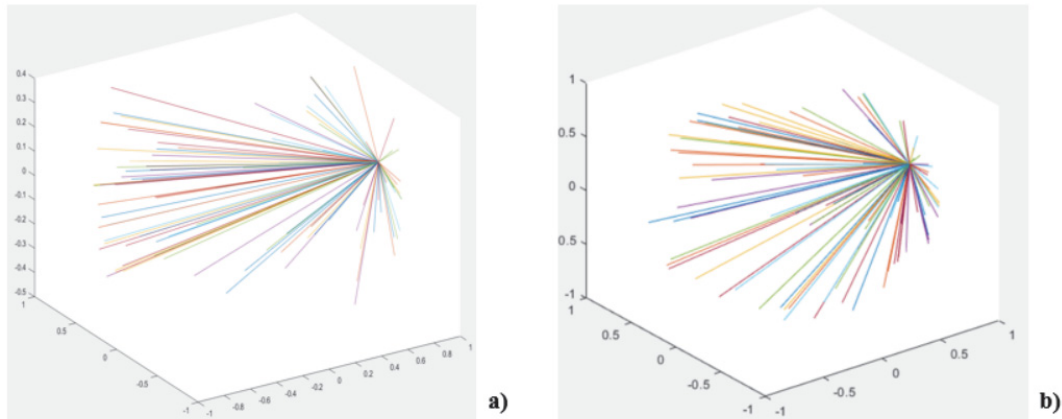


FIGURE 5.25 – Distribution 3D des orientations cristallographiques des grains les plus chargés des agrégats de Titane en déformation uniaxiale à distributions d'OC aléatoires (a) et de Burgers (b). Les couleurs associées à chaque orientation sont attribuées de manière aléatoire

Pour ces grains les plus chargés, l'écart par rapport à la théorie d'Eshelby (et donc l'influence du voisinage) est marginal sinon négligeable, faible dans le meilleur des cas, pour les deux types de distributions.

5.5.2 Distribution d'OC aléatoire *vs* Distribution de Burgers en glissement simple

La distribution des valeurs moyennes de contrainte équivalente de von Mises dans les agrégats de 600 grains - chargé en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$) cette fois - et les maximums relevés pour chaque distribution est montrée ci-dessous figure 5.26. Elle est organisée de la même manière que la figure 5.21.

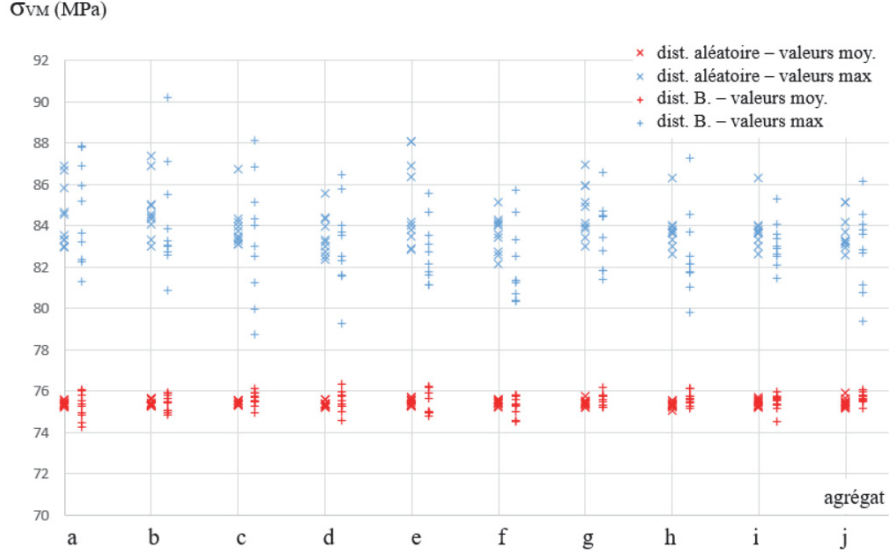


FIGURE 5.26 – Répartition des contraintes de von Mises moyennes (en rouge) et maximales (en bleu) dans les différents agrégats de Titane α chargé en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ pour les distributions d'OC aléatoires (\times) et de Burgers ($+$) associées

Les maximums et moyenne de contrainte dans chaque agrégat ne varient que peu entre distributions d'OC aléatoires et distributions de Burgers. De même, l'écart entre le maximum et le minimum est très faible (moins de 7 MPa, i.e. moins de 8.4% de la valeur moyenne). On constate donc une faible hétérogénéité du champ local, ce qui peut être mis sur le compte d'une anisotropie élastique moins prononcée que pour le 316L.

Le peu de variabilité du champ local ayant été établi, les grains les plus chargés sont-ils sensibles à l'effet du voisinage ? Pour répondre à cette question, le niveau de contrainte de ces grains va être comparé avec et sans voisinage, à l'instar des sections précédentes avec la figure 5.27, organisée comme les figures 5.22 ou encore 5.10.

Avec voisinage, la contrainte équivalente de von Mises pour les grains les plus chargés est systématiquement très inférieure à celle obtenue grâce à la théorie d'Eshelby (figure 5.27) - et sans exception contrairement au 316L. Le voisinage semble donc toujours bénéfique, voire même "*fortement bénéfique*" en ce sens qu'il diminue, parfois fortement, la contrainte vue par le grain. Le ratio $\frac{\sigma_{\text{agrégat}}}{\sigma_{\text{Eshelby}}}$ entre contrainte interne avec et sans voisins est compris entre 0.49 et 0.56. La moyenne de toutes les valeurs et son écart-type sont de (0.53 ± 0.01) . Le ratio est donc fortement différent de 1 mais la dispersion des valeurs est limitée.

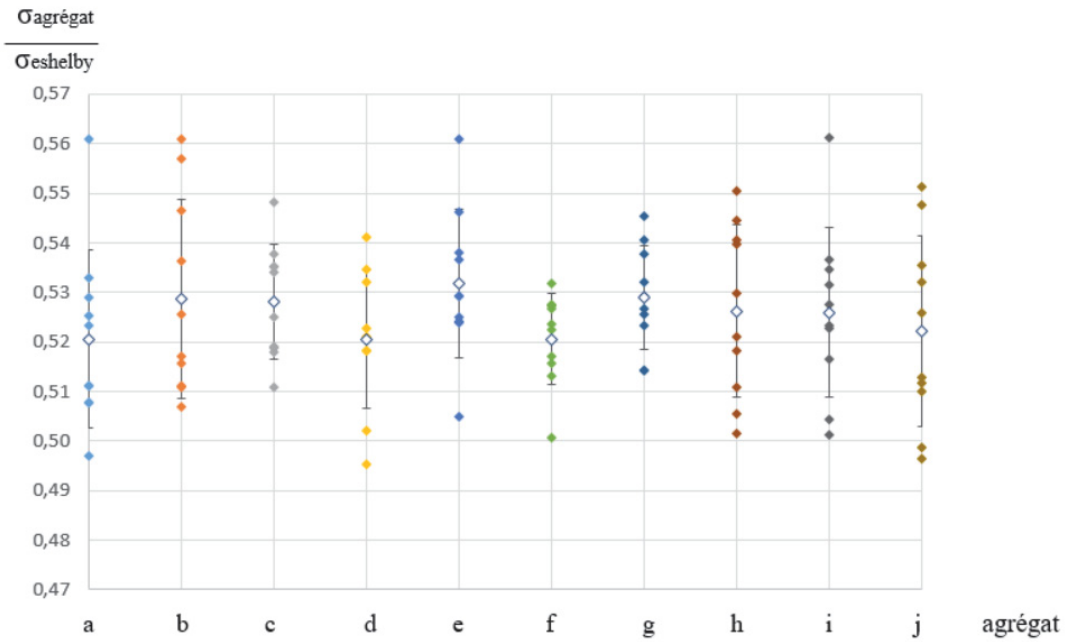


FIGURE 5.27 – Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (aléatoires ici) sont représentées. Chargement en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$

Comme dans la sous-section 5.4.2 où le chargement est également en glissement simple, les grains sont qualifiés de "*fortement influençables*" (et les voisinages associés de "*fortement bénéfiques*") lorsque le ratio est égal ou inférieur à 0.5, et pour le grain avec le ratio le plus faible - si toutes les distributions pour un agrégat donné sont au dessus de 0.5. Le cas le plus extrême étant ici le ratio le plus faible, nous allons donc nous intéresser au voisinage du grain de l'agrégat *d* avec un ratio de 0.495. Son voisinage est constitué de 15 grains soit autant que la moyenne (14.87). Ses caractéristiques ainsi que celle de ses trois premiers voisins (et les moyennes relevées dans l'agrégat) sont détaillées dans le tableau 5.13 ci-dessous.

grain n°	distance au grain <i>A</i> (en mm)	forme	k	pos. relative			Ori. spatiale			volume (en mm ³)
				X_1	X_2	X_3	ψ	θ	φ	
-	0.147	-	1.9	-			-			0.0016
570	-	Pro.	1.7	-			-42°	32°	-11°	0.0021
259	0.073	Pro.	1.98	-0.061	-0.012	-0.039	84°	130°	-73°	0.0012
227	0.091	Pro.	2.33	0.070	0.022	0.054	53°	9°	29°	0.0006
559	0.117	Pro.	1.99	-0.031	0.105	0.041	-11°	89°	-3°	0.0016

TABLE 5.13 – Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain critique *A* (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)

Les voisins ont une distance au grain qu'ils entourent bien plus faible que la moyenne. Leur volume comme leur rapport de forme est étonnement limité mais leur influence s'explique lorsqu'ils sont affichés, figure 5.28 ci-dessous.

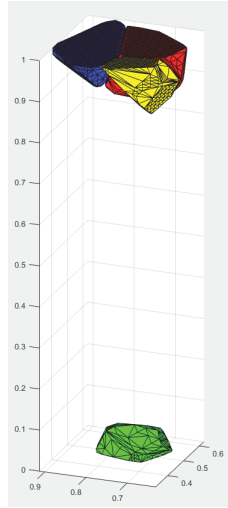


FIGURE 5.28 – grain A (n°570, en rouge) et son premier (n°259, en jaune), deuxième (n°227, en vert) et troisième (n°559, en bleu) voisins affichés sous leur forme polyédrique initiale

Il devient visible que le grain le plus critique dans cette configuration est un grain frontalier, facilement identifiable à sa large face plane (ainsi que celle des grains adjacents). Cette large face est également celle par laquelle le grain critique (en rouge, figure 5.28) est en contact avec son deuxième voisin (en vert) par le biais des conditions limites périodiques. De même, le renfoncement visible sur la partie supérieure du grain vert explique qu'il n'ait pas été approximé par une forme *Oblate*, malgré son caractère foncièrement aplati⁸. Bien qu'il soit petit (volume de 0.0006mm^3 *vs* 0.0016mm^3 en moyenne), l'influence du grain vert est transmise à travers une large surface plane, ce qui compense et donne à ce voisin une influence notable.... et peu réaliste. Lorsque l'étude est reconduite avec des distributions de Burgers, cela aboutit au graphe 5.29 ci-contre.

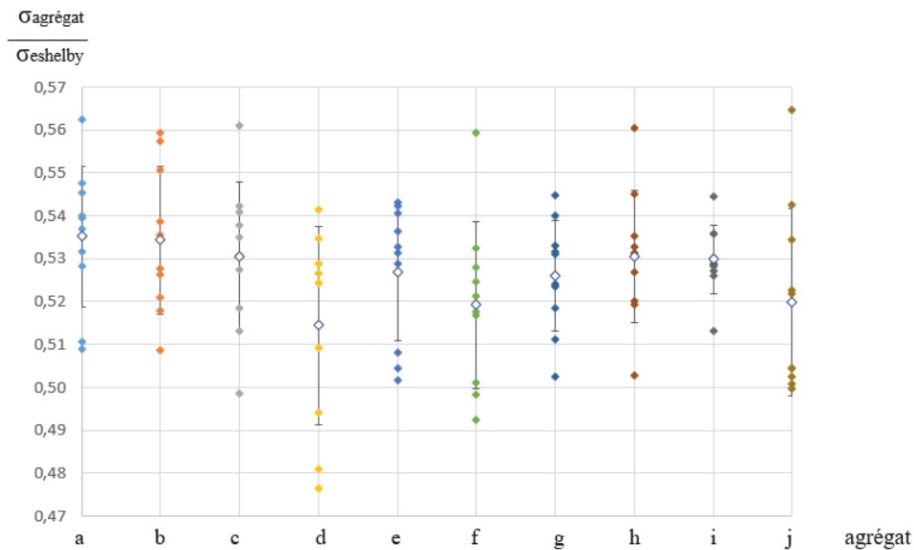


FIGURE 5.29 – Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (de Burgers ici) sont représentées. Chargement en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$

8. Du fait de la duplication de la structure, le grain vert est considéré comme un voisin direct exerçant son influence depuis un duplicata de l'agrégat et en contact direct avec le grain rouge *via* sa face plane

La contrainte équivalente de von Mises obtenue lorsque les grains étudiés - avec des OC issues des relations de Burgers cette fois - sont entourés par leurs voisinage est également toujours inférieure à celle obtenue grâce à la théorie d'Eshelby (figure 5.29). Le ratio $\frac{\sigma_{agregat}}{\sigma_{Eshelby}}$ entre contrainte interne avec et sans voisins est compris entre 0.48 et 0.57 avec une majorité de grains d'étude avec un ratio compris entre 0.51 et 0.54. La moyenne de l'ensemble des valeurs et son écart-type sont de (0.53 ± 0.02) , soit un ratio fortement différent de 1 à l'instar des distributions d'OC aléatoires, avec une dispersion un peu plus importante que ces dernières mais restant limitée. Les grains "*fortement influençables*" et les voisinages "*fortement bénéfiques*" associés sont définis comme précédemment.

La proportion d'*Oblates* est plus élevée, tant pour les distributions d'OC strictement aléatoires (45% contre 26%) que pour les distributions de Burgers (53% contre 26%), une observation qui va dans le sens de celles faites dans la sous-section 5.5.1. On note également que le taux d'*Oblates* parmi les grains les plus chargés est plus élevé dans les distributions de Burgers que parmi les distributions aléatoires, ce qui traduit une influence plus forte de la morphologie par rapport à l'orientation cristalline dans le cas des distributions de Burgers où les possibilités d'orientations cristallographiques sont limitées.

Le rapport de forme semble également plus élevé que la moyenne pour ces grains les plus chargés (respectivement 3.44 et 3.5 pour les distributions aléatoires et de Burgers *vs* 1.9 en moyenne dans les agrégats) avec présence de maximums parfois très élevés. Si la tessellation de Voronoï empêche l'apparition d'orientation spatiale préférentielle, les orientations cristallographiques sont également équiaxes tant pour les distributions d'OC aléatoires (figure 5.30a) que pour les distributions d'OC obéissant aux relations de Burgers (figure 5.30b) pour les grains les plus chargés (bien que cela soit aussi applicable aux grains constituant leurs voisinages dans les différentes configurations).

En glissement simple, l'effet du voisinage diminue la contrainte prédite par la théorie d'Eshelby, ceci avec une faible dispersion des valeurs et une amplitude supérieure aux valeurs obtenues pour le 316L (-34.72% pour les distributions aléatoires dans le 316L contre respectivement -47.46% et -47.33% pour les distributions aléatoires et de Burgers dans le Titane α). On note également l'absence de grains (toujours parmi les plus chargés) où l'effet de voisinage augmente la contrainte relevée par rapport à la théorie d'Eshelby, contrairement à ce qui a pu être observé dans le 316L.

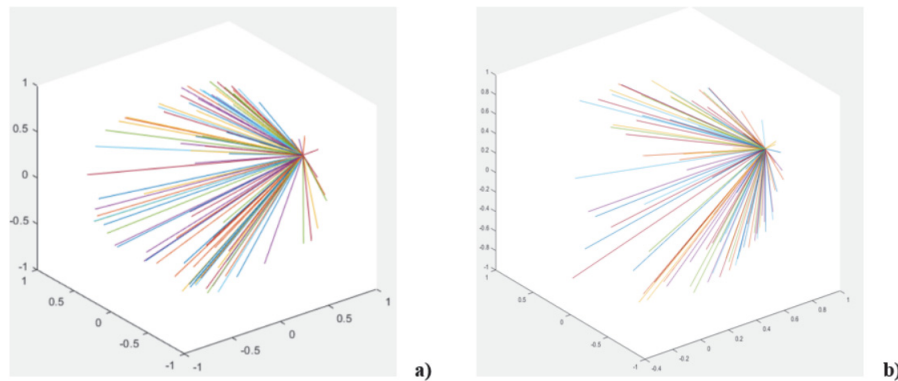


FIGURE 5.30 – Distribution des orientations cristallographiques (répartition des différents vecteurs c_1 dans l'espace) des grains les plus chargés des agrégats de Titane sous glissement simple à distributions d'OC aléatoires (a) et de Burgers (b). Les couleurs associées à chaque orientation sont attribuées de manière aléatoire

On se concentre ensuite sur les voisinages "*fortement bénéfiques*" des différents agrégats pour mettre en lumière leurs caractéristiques communes. Le graphe 5.31 ci-dessous détaille les distances inter-centroïdes des trois premiers grains du voisinage de chaque grain "*fortement influencé*" tous agrégats confondus, sur le même principe que le graphe 5.19 (sous-section 5.4.2).

A nouveau, la proximité des grains les plus "*fortement influençables*" avec leurs plus proches voisins est soulignée (0.053 contre 0.147mm, soit près de 64% plus faible). Cette proximité concerne aussi les seconds et troisièmes voisins, avec certes un écart plus faible (37.2% et 25.3% respectivement par rapport à la distance intercentroïde moyenne). La proximité entre le grain et ses premiers voisins assure une influence plus importante de ceux-ci et peut donc être à l'origine des écarts à Eshelby. Les mêmes observations peuvent être faites pour les distributions obéissant aux relations de Burgers. Que ce soit pour l'orientation spatiale (tessellation de Voronoï) ou l'orientation cristallographique (figures 5.30a et 5.30b), aucune tendance n'émerge. Concernant le taux d'*Oblates* parmi les grains les plus "*fortement influençables*"; celui-ci est élevé (respectivement 63.6% et 53.8% pour les distributions aléatoires et de Burgers). De la même façon dans le voisinage, le taux d'*Oblates* est légèrement plus élevé que la moyenne (32.1% et 30.8% contre 26% en moyenne dans les agrégats) alors qu'il est comparable à la moyenne pour le 316L pour les mêmes conditions (25.2% et 28.3%). Le nombre de voisins ne révèle aucune particularité ni tendance.

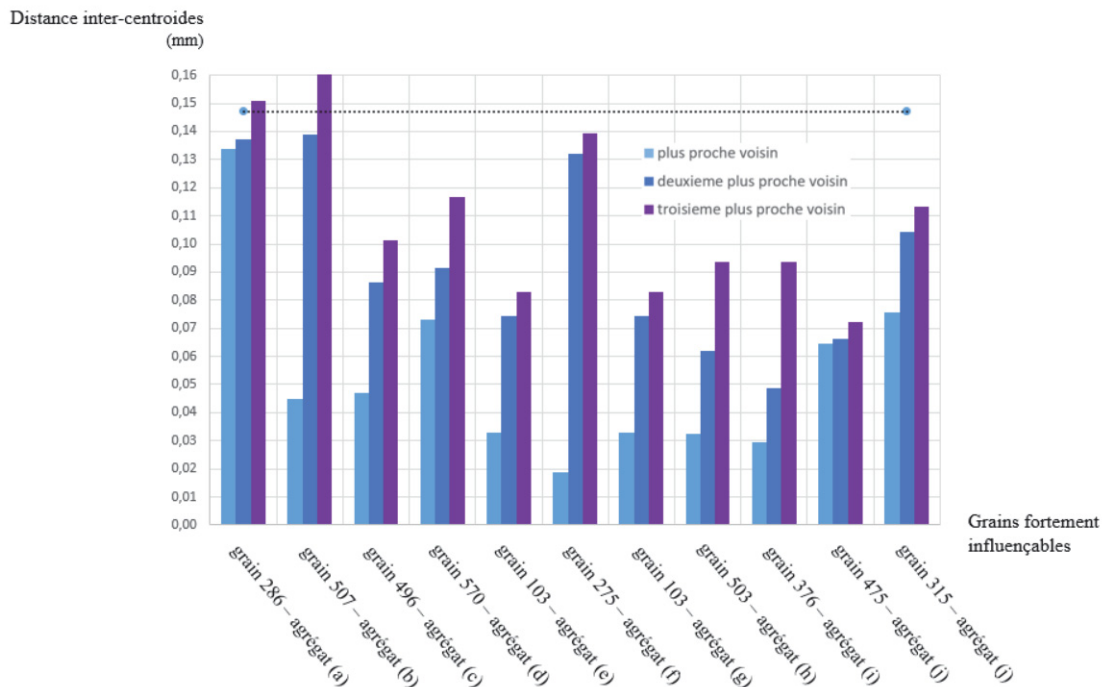


FIGURE 5.31 – Histogramme présentant les distances inter-centroïdes entre chacun des grains "*fortement influençables*" (agrégats de Titane α en glissement simple - distributions aléatoire) et leurs trois premiers voisins. En pointillés, la distance inter-centroïdes moyenne dans l'agrégat

Le rapport de forme moyen des grains les plus chargés est bien plus élevé que la moyenne (4.88 et 5.28 contre 1.9 respectivement), avec un faible écart entre les deux types de distributions (peut-être la conséquence de l'anisotropie moins prononcée pour ce matériau par rapport au 316L), ce qui semble favoriser l'apparition des contraintes extrêmes.

A l'inverse, le rapport de forme moyen des voisinages *fortement influents* correspond à la moyenne relevée dans les différents agrégats. Il semble donc que l'acuité géométrique des grains (de toute façon limitée dans un agrégat de Voronoï) ne joue ici qu'un rôle mineur. L'importance de ce paramètre gagnerait toutefois à être vérifiée dans des agrégats autorisant une plus grande excentricité des grains.

L'influence du voisinage sur les grains les plus contraints d'un agrégat, d'acier ou de Titane, sous chargement de déformation uniaxiale puis de glissement simple ayant été vue (une synthèse des effets observés est réalisée section 5.7), on s'intéresse désormais à la présence et à l'influence d'une seconde phase - minoritaire ou résiduelle - "ajoutée" à une microstructure existante sur le champ des contraintes locales, c'est à dire au sein des représentants de cette seconde phase et au sein des grains "initiaux" adjacents aux zones d'apparition de cette seconde phase.

5.6 Effet de la présence de carbures

Le but de cette section est d'introduire les conséquences de la présence de carbures dans un agrégat de 316L. Cette partie est un ajout tardif à la thèse et se base sur les travaux de stage de Nathan Turpin, dont le but était de créer une nouvelle population (en l'occurrence de carbures) au sein d'un agrégat préexistant. Les problématiques liées à la création des carbures et leur intégration au sein de l'outil GNOME ne seront que survolées ici mais elles sont toutefois présentées en détail dans l'Annexe F. La modification d'un agrégat existant pour y ajouter des formes supplémentaires offre ici de grandes possibilités. Vu qu'il s'agit d'un ajout "morphologique", il est possible d'attribuer n'importe quelles propriétés à cette nouvelle population (cavité, carbures...) et il est possible de comparer le champ local avant et après introduction de cette nouvelle population tant dans les grains de cette nouvelle phase que dans les grains de la phase pré-existante. L'ajout d'une deuxième population ouvre d'ailleurs la voie à la modélisation de matériaux multiphasés.

5.6.1 Forme, Volume et nombre de voisins

Les carbures ont été ajoutés à dix des agrégats de 600 grains générés sections 5.2 à 5.5. Il est choisi arbitrairement de générer 12 carbures dans chaque agrégat. Ces carbures sont considérés ici comme des inclusions isotropes de module d'Young $E_{carb} = 400$ GPa et de coefficient de Poisson $\nu_{carb} = 0.2$ (il s'agit d'un carbure générique de composition non précisée et aux propriétés estimées). Il faut préciser ici (voir Annexe F pour plus de détails) que les voxels ont une identification unique, donc ceux ayant été identifié comme faisant partie des carbures lors de leur croissance dans la microstructure déjà constituée n'appartiennent plus à leur ancien grain. De ce fait ces derniers perdent leur convexité d'origine. Néanmoins, l'approximation par sphéroïde inertiuellement équivalent de ces carbures se fait *après* la création de tous les grains *et* carbures et fonctionne donc comme décrit précédemment (sous-section 4.2.2, chapitre 4). Par contre, pour limiter la perte de convexité et éviter de rendre cette approximation aberrante, la création de carbures intragranulaire a cependant été interdite : ceux-ci ne peuvent "naître" que dans les joints de grains.

Cinq nouvelles microstructures ont été générées avec des carbures à croissance isotrope (microstructures nommées C01 à C05) et cinq autres nouvelles microstructures ont été générées avec des carbures à croissance sphéroïdale (microstructures nommées C06 à C10⁹).

9. l'orientation spatiale des demi-axes et le rapport de forme du sphéroïde de référence étant aléatoirement choisis pour chaque carbure. Le rapport de forme est arbitrairement borné entre 1 et 5, voir annexe F

Les probabilités d'apparitions dans les joints quadruples, triples et doubles sont respectivement de 10%, 1% et 0.02% (voir annexe F pour plus de détails). A noter qu'on aurait aussi pu relancer plusieurs fois un processus d'apparition de carbures sur une même microstructure.

Dans ces microstructures la proportion d'*Oblates parmi les carbures* va de très faible (3.3% pour les microstructures C01 à C05) à relativement importante (40% pour les microstructures C06 à C10). Les rapports de formes des sphéroïdes approximant les carbures sont systématiquement très faibles, inférieur à 1.7 (comme le montre la figure 5.32). C'est particulièrement le cas pour les microstructures C01 à C05 (figure 5.32a), ce qui montre le caractère quasi-sphérique des inclusions générées par croissance isotrope.

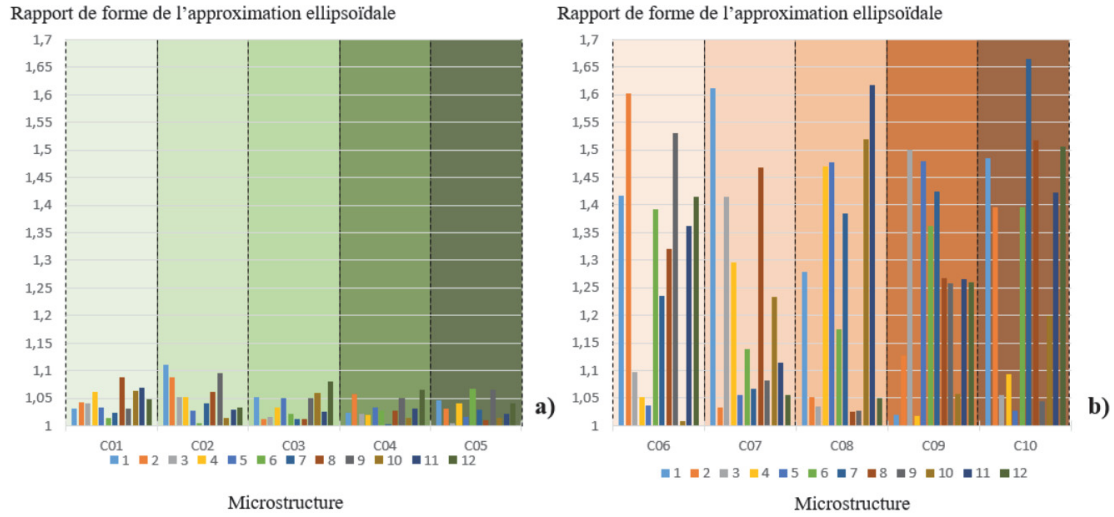


FIGURE 5.32 – Rapport de forme des sphéroïdes équivalents approximant les formes pour les 12 carbures des microstructures C01 à C05 (a) et C06 à C10 (b)

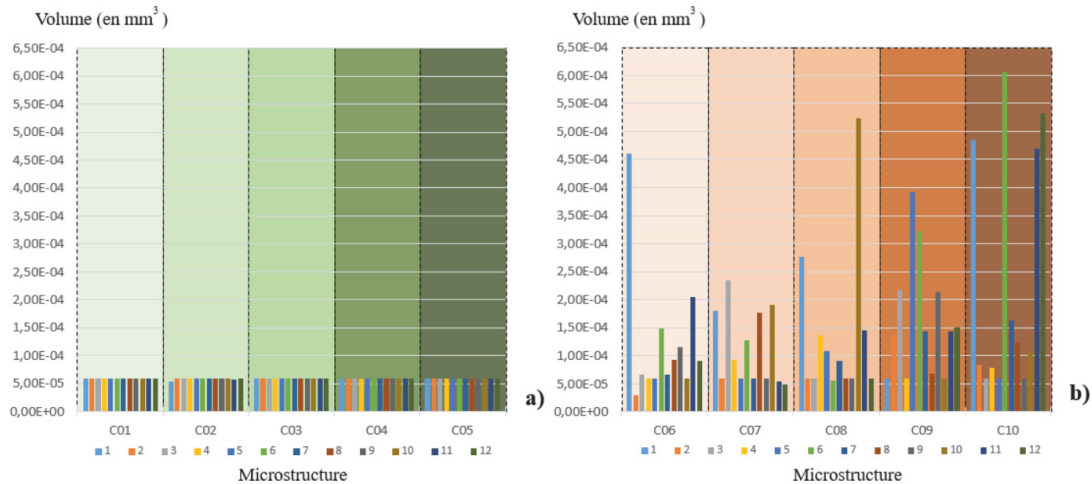


FIGURE 5.33 – Volume des sphéroïdes équivalents approximant les formes pour les 12 carbures des microstructures C01 à C05 (a) et C06 à C10 (b)

Concernant le volume des carbures générés, seuls les voxels situés dans un rayon de 0.05 fois le rayon moyen sphérique¹⁰ sont susceptibles de faire partie du carbure, ceci afin d'éviter que les carbures ne croissent trop au point de faire disparaître des grains préexistants. Cette limitation et cette valeur ont été imposés de manière arbitraire dans le code.

Les résultats sont très différents selon la méthodologie utilisée (génération homothétique ou génération à croissance sphéroïdale) : comme visible sur la figure 5.33a, les carbures présents dans les microstructures C01 à C05 ont un volume quasiment identique de $5.87\text{e-}5 \text{ mm}^3$ (seul deux carbures font exception avec $5.43\text{e-}5 \text{ mm}^3$ et $5.68\text{e-}5 \text{ mm}^3$) soit 3.67% du volume moyen d'un grain ($1.6\text{e-}2 \text{ mm}^3$, valeur stable d'une microstructure à l'autre).

Les carbures à croissance sphéroïdale, eux, ont des volumes bien plus hétérogènes (figure 5.33b) avec une moyenne de $(1.51 \pm 1.41)\text{e-}4 \text{ mm}^3$ (soit environ 10% du volume moyen d'un grain) avec un minimum à $2.93\text{e-}5 \text{ mm}^3$ (1.8% du volume moyen d'un grain) et un maximum à $6.06\text{e-}4 \text{ mm}^3$ (37.9% du volume moyen d'un grain). Cette deuxième méthode présente donc des résultats contrastés selon le caractère favorable ou non de l'environnement autour d'elle, ce qui la rend plus réaliste que la première.

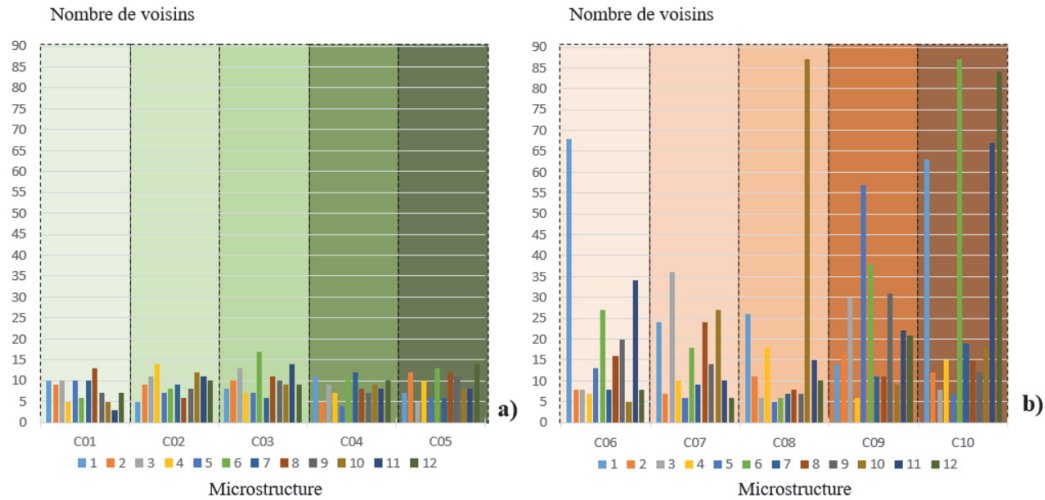


FIGURE 5.34 – Nombre de voisins pour les 12 carbures des microstructures C01 à C05 (a) et C06 à C10 (b) pour un rayon cadastral $\mathcal{R}_C = 6$

Enfin, on remarque que les carbures se distinguent tous par un faible nombre de voisins - lesquels sont identifiés de la même manière que pour les grains, voir sous-section 4.2.3, chapitre 4 - bien moins important que les grains (à $\mathcal{R}_C = 6$, les grains ont en moyenne environ 200 voisins, nombre pouvant être localement bien plus important, voir figure 4.15, chapitre 4) comme le montre la figure 5.34, ce qui est une conséquence de leur petite taille relative par rapport aux grains.

On note cependant que les grains à croissance isotropes (microstructures C01 à C05) ont un nombre de voisins très faible (de 4 à 17, avec une moyenne de 9.0 ± 2.9) tandis que les carbures à croissance sphéroïdale (microstructures C06 à C10) parviennent à avoir un nombre de voisins bien plus variable (de 7 à 87, avec une moyenne de 21.6 ± 21.0).

10. rayon que posséderait un grain de volume, le volume moyen s'il avait une forme de sphère

Cette différence est due à la forme (avant approximation) des carbures dans les microstructures C06 à C10 qui peut être *Prolate* ou *Oblate* avec un rapport de forme aléatoire pouvant aller jusqu'à $kC_{max} = 5$ (voir annexe F), ce qui met le carbure potentiellement en contact avec un nombre plus élevé de grains. Néanmoins la petite taille relative des carbures n'est que partiellement compensée par ces rapports de forme et le nombre de voisins reste bien inférieur à la moyenne pour les grains.

Maintenant que la forme des carbure et leur nombre de voisins sont connus, il faut quantifier dans quelle mesure ces carbures vont être affecté par leur voisinage, et réciproquement.

5.6.2 Influence du voisinage "granulaire" sur les carbures

Considérons les différentes microstructures C01 à C10 soumises à une déformation uniaxiale selon X_3 d'amplitude $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (figure 5.35a), puis à un glissement simple de même amplitude dans le plan $(X_1; X_2)$ (figure 5.35b). La contrainte équivalente de von Mises au centroïde des grains est comparée entre avec et sans voisinage.

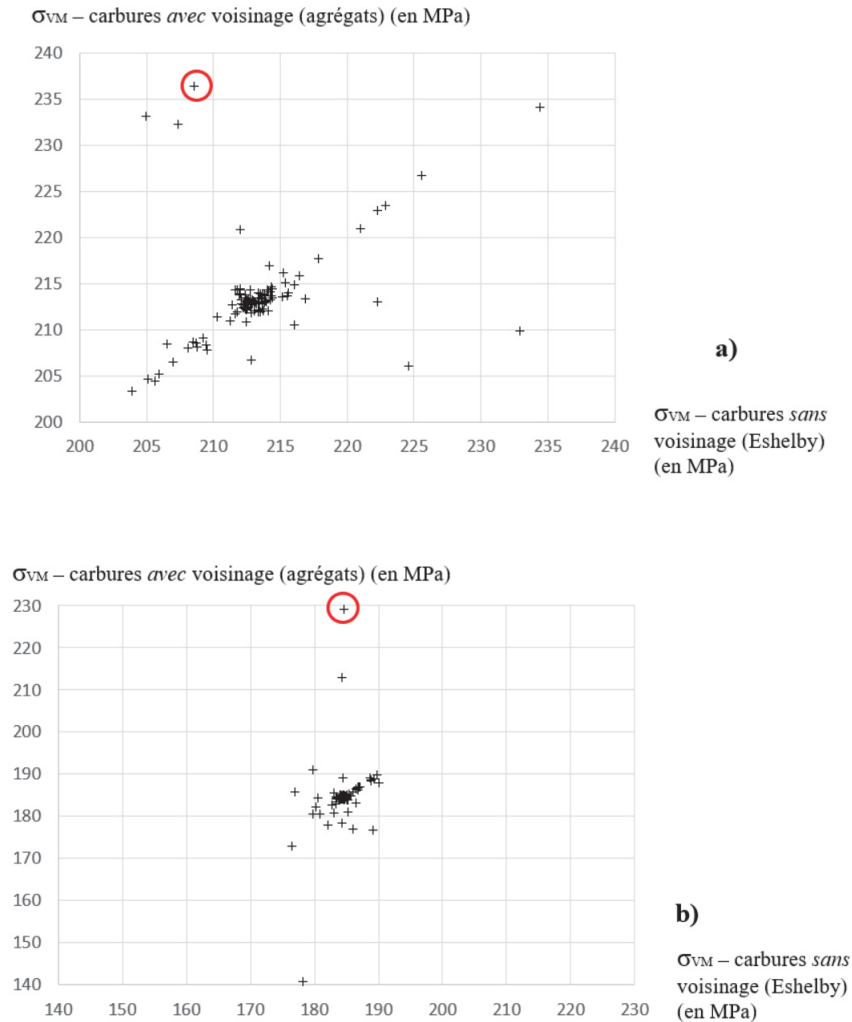


FIGURE 5.35 – Corrélation des contraintes de von Mises interne à chaque carbure, pour les dix microstructures concernées, pour un chargement tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (a) puis tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ (b) entre configuration avec voisinage (en ordonnée) et sans (en abscisse). Les pires cas, étudiés ensuite, sont entourés en rouge

En déformation uniaxiale (figure 5.35a), un nombre non-négligeable de carbures n'est que peu influencé par son voisinage immédiat - peut-être s'agit-il ici des carbures à croissance isotrope qui n'ont que peu de voisins? Pour les autres, la présence du voisinage peut modifier l'état de contrainte de manière significative : l'augmentation de contrainte la plus importante du fait de la présence du voisinage est ainsi de 14% en déformation uniaxiale (dans le carbure C09-5, voir figure 5.36a).

En glissement simple, une plus grande proportion de carbures semble sensible à la présence d'un voisinage : l'augmentation de contrainte la plus importante du fait de la présence du voisinage est ainsi de 24% (dans le carbure C01-1, voir figure 5.36c). Les deux carbures correspondants sont présentés seuls puis avec leurs premiers voisins figure 5.36.

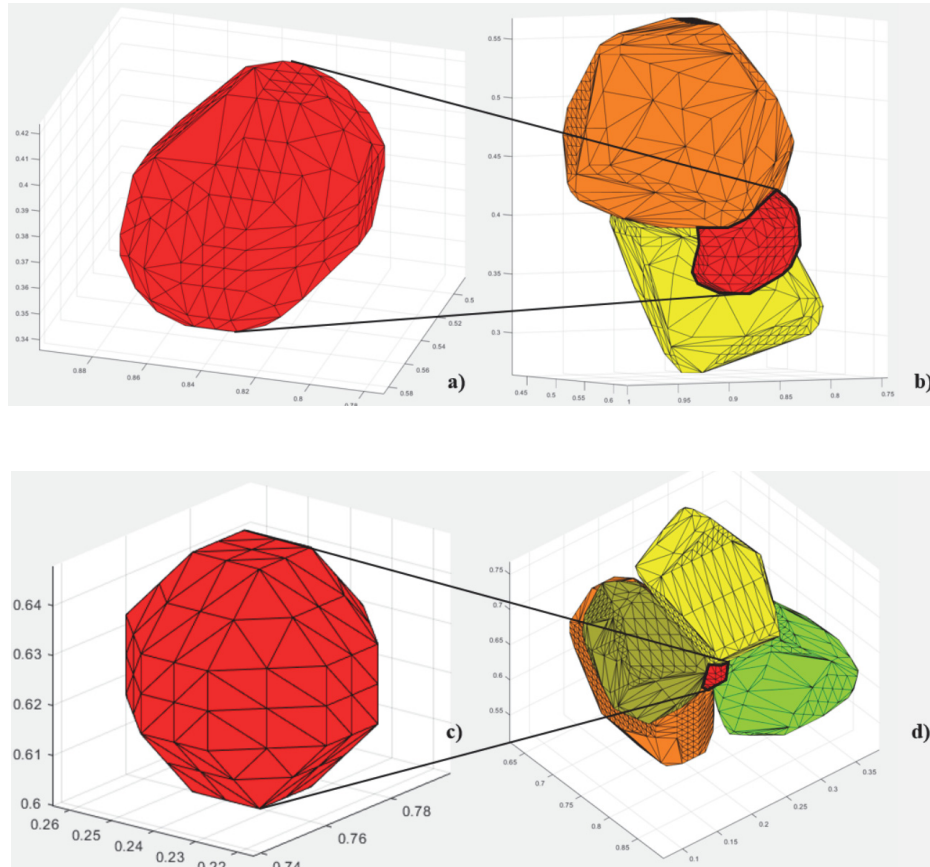


FIGURE 5.36 – Carbure C09-5 isolé (a) et entouré de ses deux premiers voisins (b). Carbure C01-1 isolé (c) et entouré de ses quatre premiers voisins (d)

Le carbure C09-5 (figure 5.36a) a été généré par croissance sphéroïdale, ce qui explique sa forme *Oblate* (avec un rapport de forme de $kC = 1.48$). Malgré un volume limité ($3.9 \cdot 10^{-4} \text{mm}^3$ soit 24% du volume moyen d'un grain), cette taille est imposante pour un carbure (près de 5 fois le volume moyen d'un carbure qui est de $8 \cdot 10^{-5} \text{mm}^3$) et est probablement à l'origine d'un nombre élevé de voisins (pour un carbure) : 57 voisins. A noter toutefois que six carbures sont plus gros que C09-5 (C10-6, C08-8, C10-9, C10-10, C10-1, C06-1, voir figure 5.33b) mais sont peu affectés (moins de 2.5MPa d'écart entre avec ses voisins et carbure isolé, ceci pour les deux types de chargement) de ce fait, le volume ne semble pas avoir d'influence sur le niveau de contrainte des carbures.

Parmi les deux premiers voisins, sont présents les grains n°283 (en jaune figure 5.36b) et 554 (en orange figure 5.36b). Il est à noter que ce dernier est un des grains les plus gros de l'agrégat (volume de 0.0031mm^3 soit près du double du volume moyen) et que le carbure se situe au milieu d'une arête aiguisée pour les deux grains ce qui est à l'origine d'un fort effet de voisinage bien que peu naturel. A remarquer également que l'écart de contrainte entre avec et sans voisinage est élevé dans le carbure C09-5 pour les deux chargements (27.8 MPa d'écart en déformation uniaxiale et 28.8 MPa d'écart en glissement simple).

Le carbure C01-1 (figure 5.36c) a été généré par croissance isotrope, d'où une forme quasi-sphérique. Le très petit volume de celui-ci ($5.9.10^{-5}\text{mm}^3$, 3.7% du volume moyen d'un grain) implique que le polyèdre ainsi créé est une approximation relativement grossière d'une sphère et donne en l'occurrence un octaèdre tronqué régulier. Si du fait de cette taille modeste, le carbure C01-1 n'a que 10 voisins, il est situé au sommet commun de cinq d'entre eux (figure 5.36d) maximisant ainsi les concentrations de contraintes possibles d'une part (présence de plusieurs sommets aigus agissant comme des concentrateurs de contraintes), et possédant un grand nombre de voisins directs pour sa taille d'autre part (de volumes à peu près égaux au volume moyen soit 27 fois le volume du carbure C01-1); le tout augmentant ainsi l'effet du voisinage sur sa contrainte interne.

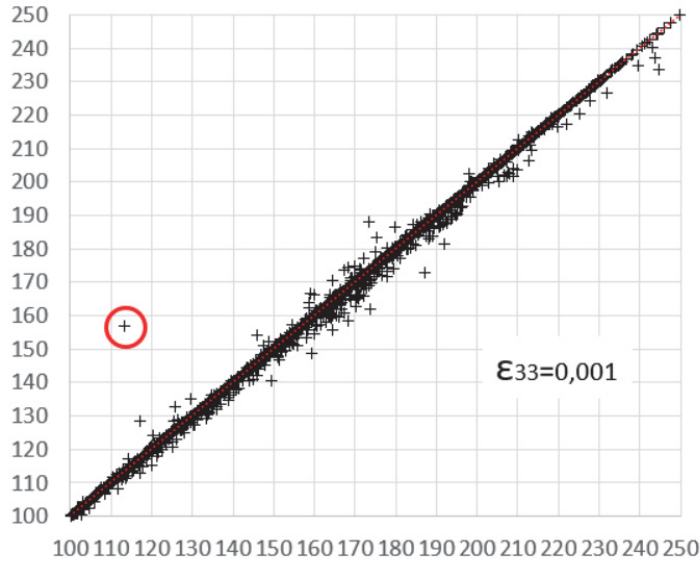
5.6.3 Influence d'un voisinage "carburé" sur les grains

Après avoir abordé l'effet du voisinage sur les carbures, on veut (ré)étudier l'effet du voisinage sur les grains lorsque leurs voisinages intègrent des carbures, ceci pour estimer les écarts de contrainte induits par leur présence dans le voisinage. On utilise donc les résultats de la sous-section 5.6.2 sous un angle différent.

Les carbures possédant un volume réduit et étant présents en très petit nombre dans la microstructure, la majorité des grains ne sont pas affectés par leur apparition dans la microstructure (voir figure 5.37), ce qui se traduit par des bornes de dispersion faibles, surtout en glissement simple (figure 5.37b). Dans ce cas-ci, à part un cas où la présence de carbure semble plutôt bénéfique (17% de diminution, grain C09-g230, en bleu figure 5.38b), leur présence passe relativement inaperçue. En revanche, en déformation uniaxiale (figure 5.37a). Les grains semblent davantage affectés par la présence de carbures dans la microstructure. Leur présence semble se traduire par une baisse (limitée) de la contrainte pour une majorité de grains, à une exception notable près où le grain voit une sévère augmentation de sa contrainte interne du fait de l'existence des carbures (38.7% d'augmentation, grain C10-g76, en bleu figure 5.38a).

Le grain C10-g76 (en bleu figure 5.38a) subit une contrainte bien plus importante lorsque les carbures sont présents dans la microstructure. En examinant son voisinage, on peut voir trois carbures de petite taille présents du même côté (en rouge figure 5.38a, avec respectivement 1.8%, 1.8% et 2.5% du volume du grain C10-g76 qui est de 0.0032mm^3). Parmi ces carbures se trouve d'ailleurs le n°C09-5 qui avait été identifié comme un des carbures les plus affectés par son voisinage (sous-section 5.6.2). A l'inverse, le grain C09-g230 (en bleu, figure 5.38b) subit une contrainte bien plus faible lorsque les carbures sont présents dans la microstructure. En examinant son voisinage, on peut voir un unique carbure (en rouge, figure 5.38b), mais de taille imposante (21.5% du volume du grain qui est de 0.0015mm^3) à proximité immédiate du grain (en rouge figure 5.38b). On peut donc supposer que la contrainte semble mieux transmise du grain vers le carbure lorsque celui-ci est gros par rapport au grain et à proximité immédiate du maximum local. Le faible nombre de cas ne permet pas d'étayer cette observation mais la génération de microstructures supplémentaires et les essais statistiques correspondants permettraient de confirmer utilement la validité de ces observations.

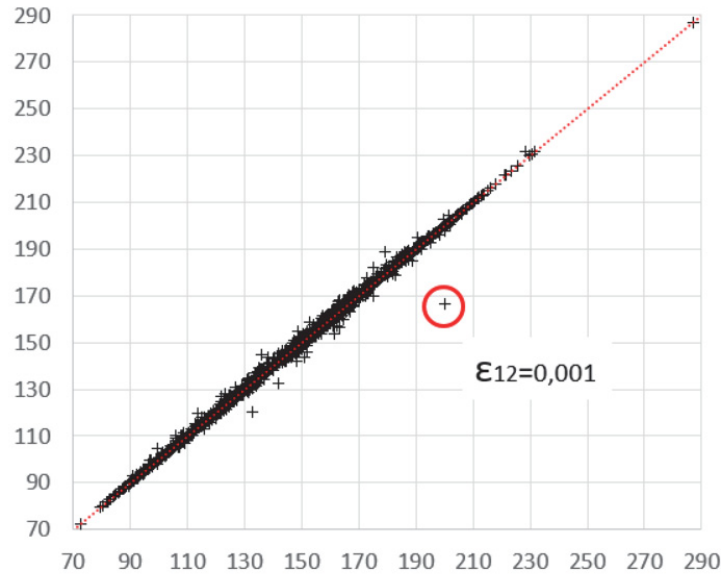
σ_{VM} dans les grains - voisinages *avec* carbures (en MPa)



a)

σ_{VM} dans les grains
- voisinages *sans*
carbures (en MPa)

σ_{VM} dans les grains - voisinages *avec* carbures (en MPa)



b)

σ_{VM} dans les grains
- voisinages *sans*
carbures (en MPa)

FIGURE 5.37 – Corrélation des contraintes aux centroïdes des grains avec existence des carbures dans la microstructure et sans, pour un chargement respectivement tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (a) et $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ (b), tous grains de toutes les microstructures confondus. Les cas extrême, étudiés ensuite, sont entourés en rouge

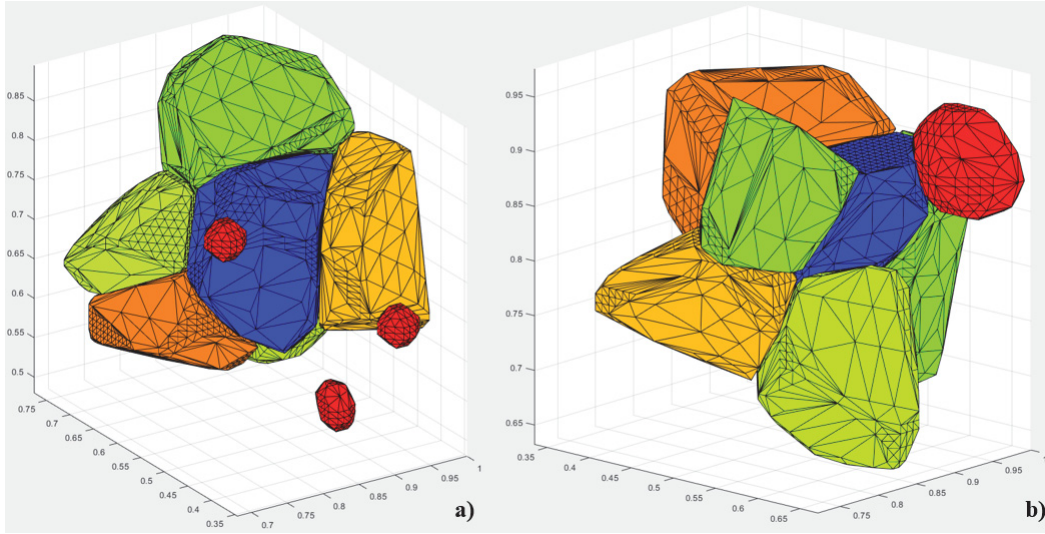


FIGURE 5.38 – Vue partielle du voisinage du grain C10-g76 (en bleu) avec les carbures du voisinage (en rouge)(a); Vue partielle du voisinage du grain C09-g230 (en bleu) avec les carbures du voisinage (en rouge)(b)

5.7 Bilan du chapitre V

Concernant l'influence des caractéristiques d'une inclusion sphéroïdale isolée sur le champ local :

- ★ Soit une inclusion à $OS = [0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$ et à OC fixée, pour des rapports de forme k variables, allant de 1 (forme sphérique de référence) jusqu'à 20. On s'intéresse à l'évolution de la contrainte dans l'inclusion. Ainsi, il apparaît que la forme *Prolate* induit des variations plus importantes - par rapport à la forme sphérique (de -5% à +16% à $k = 20$) que la forme *Oblate* (variation de +/- 3%) - tant pour la traction uniaxiale que pour le cisaillement (ici contrôlé en déformation). Dans le cas de la traction uniaxiale, l'augmentation rapide de l'acuité géométrique dans le cas *Prolate* (et sa faible variation dans le cas *Oblate*) semble être à l'origine des variations observées.
- ★ Soit désormais une inclusion de rapport de forme fixe ($k = 5$) avec différentes orientations spatiales. On s'intéresse maintenant à la variation de la contrainte interne lorsque l'orientation spatiale de l'inclusion par rapport au chargement varie. Pour les deux formes, en traction uniaxiale et en cisaillement, une symétrie de comportement de la contrainte interne apparaît lorsque l'orientation cristallographique est égale à $[0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$. Les variations de la contrainte interne par rapport à l'orientation spatiale $[0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$ ne sont pas négligeables avec un écart allant de -22% à +27%. Lorsque l'orientation cristallographique est différente, l'évolution de la contrainte interne en fonction de l'orientation spatiale du sphéroïde est plus complexe. L'écart par rapport à l'orientation spatiale $[0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$ est également plus faible car compris entre -15% et +16%.

- ★ Enfin, on considère un sphéroïde *Oblate* ($OC=[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$, $k = 5$), chargé en traction uniaxiale. Ici, c'est l'environnement immédiat de l'inclusion qui est scruté, en l'occurrence la variation de contrainte le long d'un axe partant de l'interface entre l'inclusion et le milieu infini. Lorsque cet axe est colinéaire à X_2 (du repère global), il conserve donc la même orientation lorsque l'*Oblate* en change, il apparaît que l'orientation spatiale à $[0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$ est la plus influente car elle présente la plus forte acuité géométrique face au chemin de mesure. Cette influence s'exprime entre 0 et 0,2mm de l'interface (-15% à +4% par rapport à la contrainte à l'infini). Lorsque cet axe est colinéaire à x_2 (du repère morphologique) et garde donc le même positionnement par rapport à l'*Oblate* lorsqu'il change d'orientation, il apparaît que l'influence de la forme *Oblate* est particulièrement importante à $[0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$ (cas identique au précédent, x_2 et X_2 étant confondus) et à $[0^\circ \ 90^\circ \ 0^\circ]$ où la contrainte atteint +18% par rapport à la contrainte infinie à 0.1mm de l'interface.

Concernant l'effet de voisinage dans les agrégats de grains :

- ★ Le champ local varie davantage dans un agrégat de 316L par rapport à un agrégat de Titane pour les deux chargements étudiés, probablement du fait de la plus grande anisotropie élastique du 316L.
- ★ Lorsque l'agrégat est en déformation uniaxiale, le voisinage des grains les plus chargés de chaque agrégat pour les différentes distributions est systématiquement nuisible (*i.e.* augmente toujours la contrainte vue par le grain) pour le 316L et quasiment systématiquement nuisible pour le Titane. Si ces variations sont négligeables dans le cas du Titane, elles peuvent être très importantes dans le cas du 316L ($\frac{\sigma_{agregat}}{\sigma_{Eshelby}} > 2$).
- ★ Lorsque l'agrégat est en glissement simple, le voisinage des grains les plus chargés de chaque agrégat pour les différentes distributions diminue quasiment systématiquement la contrainte vue par ceux-ci par rapport à la contrainte prédite par Eshelby. Cette diminution n'est négligeable ni pour le 316L ni pour le Titane (il y a des cas où $\frac{\sigma_{agregat}}{\sigma_{Eshelby}} < 0.5$ pour les deux matériaux). A noter que dans quelques rares cas et pour le 316L uniquement, la contrainte augmente légèrement au lieu de diminuer.
- ★ Parmi les grains les plus chargés des différents agrégats, la forme *Oblate* est systématiquement et parfois drastiquement surreprésentée (45% à 67% d'*Oblates* parmi les grains les plus chargés alors qu'ils ne représentent en moyenne que 26% des grains dans les différents agrégats) et le rapport de forme de ces grains est également plus élevé que la moyenne ($k = 2.47$ à 3.93 contre 1.9 en moyenne dans les agrégats). Donc la forme *Oblate* et une forte acuité géométrique semblent favoriser l'apparition de maximums locaux.
- ★ Les grains considérés comme les plus "*fortement influençables*" ont pour caractéristique commune d'avoir leurs premiers voisins beaucoup plus proches que la moyenne dans l'agrégat. Par contre le nombre de leur voisins est proche de la moyenne relevée dans les agrégats. La majeure partie de l'effet de voisinage semble donc due aux voisins les plus proches, spécialement s'ils ont un volume bien supérieur ou présentent des saillants géométriques (arêtes...).

Concernant l'effet de la présence de carbures dans la microstructure :

- ★ Il est possible d'aboutir à deux morphologies de carbures très différentes selon la méthode de croissance choisie : isotrope (carbures quasi-sphériques) ou sphéroïdale (carbure sphéroïdaux de rapport de forme limité, inférieur à 2, mais plus gros que les quasi-sphères).
- ★ Du fait de leur petite taille imposée, les carbures ont - à rayon cadastral identique - bien moins de voisins que les grains. Une dizaine pour les carbures à croissance isotrope et un nombre plus variable pouvant atteindre presque la centaine pour les carbures à croissance sphéroïdale contre environ 200 en moyenne pour les grains.
- ★ Une partie des carbures n'est que peu affectée par la présence d'un voisinage, ce quelque soit le chargement, peut-être du fait d'un faible nombre de voisins. Toutefois une minorité est assez fortement influencée par son voisinage avec des augmentations pouvant atteindre 14% en déformation uniaxiale et 24% en glissement simple. Dans les deux cas précédents, la morphologie et le positionnement des voisins les plus proches ont joué un rôle majeur sur la contrainte interne au carbure. Il faut toutefois relativiser ces résultats par le faible nombre d'occurrences observées.
- ★ Peu de grains - quelque soit le chargement - sont significativement affectés par la présence de carbures dans la microstructure existante. Leur présence passe quasiment inaperçue pour un chargement de glissement simple, à une exception près (un grain adjacent à un gros carbure voit sa contrainte diminuer de 16.8%). Leur influence est un peu plus marquée en déformation uniaxiale et contribue à une légère baisse de la contrainte dans les grains dans la majorité des cas, avec toutefois également une notable exception (un grain, voisiné par 3 carbures voit sa contrainte augmenter de 37.8%). Ceci montre que la présence de carbures peut se révéler très nocive dans certains cas extrêmes. La génération d'agrégats et d'essais supplémentaires pourrait permettre d'affiner l'analyse des causes de ces cas extrêmes.

Conclusions et Perspectives

Contents

6.1	Rappel et Analyse des principaux résultats	152
6.2	Hypothèses et Limites de l'outil GNOME	154
6.3	Perspectives et Développements futurs	156

6.1 Rappel et Analyse des principaux résultats

L'effet du voisinage d'un grain dans un polycristal est un phénomène connu de la littérature scientifique, entre autres comme étant une cause de dispersion des résultats. Toutefois, dès lors qu'on cherche à le définir explicitement ou à décomposer son effet, les méthodes existantes se révèlent insatisfaisantes, soit parce qu'elles minorent l'effet des voisins, soit parce qu'elles ont un coût de calcul trop élevé pour des applications statistiques, et aucune ne permet d'accéder à l'effet individuel de chaque voisin.

Dans le cadre de l'élasticité linéaire, le modèle de Bretin [Bretin et *al.*, 2019a ; Bretin et *al.*, 2019b ; Bretin et *al.*, 2020 ; Bretin, 2020] - basé sur une approche Automate Cellulaire (AC) - est le premier à modéliser explicitement l'effet du voisinage et à distinguer les influences séparées de chacun des voisins, ceci grâce à la loi de transition de l'AC. Il représente un compromis entre précision du champ local des contraintes obtenu et coût du calcul. Néanmoins, ce modèle - focalisé sur l'influence des orientations cristallographiques (OC) - utilise une structure de Kelvin bien trop régulière qui ne permet pas de connaître l'influence de la morphologie des voisins.

Un objectif de la présente thèse a donc été d'enrichir le modèle de Bretin en y incorporant l'influence de la morphologie. Dans un premier temps, la base de données (construite par EF) du modèle de Bretin a été remplacée par un module EIM analytique fondé sur les travaux d'Eshelby [Eshelby, 1957 ; Eshelby, 1959 ; Eshelby, 1961]. Il s'agit d'un module de calcul unifié permettant de calculer les champs mécaniques à l'intérieur et à l'extérieur d'une inhomogénéité sphéroïdale (sphérique, *Prolate*, *Oblate*) isotrope ou anisotrope, spatialement orientée dans un milieu infini isotrope. Ces capacités ont été ajoutées progressivement et validées à chaque fois par des confrontations à des simulations en champs complets par EF faisant ici office de référence, et à des abaques de la littérature [Shibata & Ono, 1978 ; Mura, 1987] lorsque ceux-ci étaient disponibles. Les vérifications ont été réalisées tant à l'intérieur des inclusions que dans leur proche environnement. A cette oc-

casion, un formalisme a été introduit quant à la gestion de l'application du chargement, de l'orientation spatiale de l'inclusion et de sa combinaison avec l'orientation cristallographique pour des inclusions anisotropes, trois systèmes d'axes coexistant dans ce dernier cas.

Une fois validé, le module EIM a été intégré au modèle de Bretin, renommé alors *Bretin-EIM*. Les résultats du modèle *Bretin-EIM* ont été confrontés avec succès à une simulation en champs complets par EF modélisant un agrégat de Kelvin. L'étape suivante du développement a ainsi pu être enclenchée : le passage à une microstructure moins régulière. Il a fallu pour cela, d'abord développer un module de génération d'agrégats pouvant accepter différentes tessellations (Voronoi, Laguerre, Johnson-Mehl). Chaque grain étant désormais entouré d'un environnement différent, il a également fallu développer un module d'identification des voisins pour pouvoir appliquer la loi de transition de l'Automate Cellulaire. Dans le même temps, afin de pouvoir appliquer les équations du module EIM, il a fallu déterminer un sphéroïde équivalent pour chaque grain. Cette approximation sphéroïdale - reposant sur une équivalence des matrices d'inertie en s'inspirant des travaux de [Nadot et al., 2020] - a également été codée dans un module. L'intégration de l'ensemble de ces nouveaux modules au modèle de Bretin-EIM a mené à l'outil de calcul baptisé *GNOME*, pour **G**énération de **p**Olycristaux avec **M**orphologie et **E**ffets de voisinage.

L'influence de paramètres tels que le nombre de grains dans l'agrégat étudié, ou encore le nombre de voisins à considérer pour chaque grain, sur les résultats de calculs produits par l'outil GNOME a été scrutée pour différents chargements, et l'outil a également été comparé à des simulations en champs complets par EF utilisant strictement le même agrégat. La corrélation des résultats GNOME et EF est excellente dans le cas du Titane mais moins bonne dans le cas du 316L, probablement au moins en partie du fait de la plus forte anisotropie de sa maille cristalline.

Une fois l'outil GNOME opérationnel, deux problématiques de recherches ont été explorées. D'une part, l'influence d'une inclusion isolée (isotrope, puis anisotrope) sur elle-même et son proche environnement en fonction de son orientation spatiale et de sa morphologie a été étudiée. D'autre part, l'utilisation de grandes séries de données a été exploitée pour faire émerger les caractéristiques des voisinages les plus nuisibles - dans le sens où ces derniers font augmenter la contrainte dans le grain qu'ils entourent. Les principaux résultats obtenus sont résumés ci-dessous.

Pour une inclusion isolée :

- * Pour un chargement de traction le long de l'axe de révolution d'un sphéroïde anisotrope ($OC=[0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$), l'influence du rapport de forme (k) sur la contrainte interne à l'inclusion est plus forte avec un sphéroïde *Prolate* qu'avec un *Oblate*. Pour un *Prolate*, la contrainte interne peut ainsi augmenter de 16% (à $k = 20$) par rapport à sa valeur pour la forme sphérique.
- * Quand aucune orientation cristallographique (OC) n'est considérée, l'orientation spatiale (OS) a un effet significatif sur l'état de contrainte à l'intérieur de l'inclusion sphéroïdale. Par rapport au cas de référence ($OS = [0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$), les variations de la contrainte interne peuvent aller de -22% à +27%, selon la forme et le chargement appliqué.
- * L'application d'une OC à l'inclusion rend plus complexe l'évolution de la contrainte avec l'orientation spatiale. Les variations par rapport au cas de référence ($OS = [0^\circ \ 0^\circ \ 0^\circ]$) sont également moins intenses car comprises entre -15% à +16%, selon la forme et le chargement appliqué.

- * Le gradient de contrainte dans la matrice le long des axes global et morphologique depuis l'interface avec une inclusion *Oblate* a été illustré pour plusieurs orientations spatiales par rapport à l'axe de chargement. L'augmentation par rapport à la contrainte appliquée à l'infini peut atteindre presque 20% avec une OC maximisant la rigidité dans la direction de chargement, lorsque la direction de traction coïncide en plus avec un chemin de mesure commençant au point de l'interface où l'acuité géométrique est à son maximum. Les effets géométrique et matériau (contraste de rigidité) sont ici maximisés.

Pour les agrégats :

- * En déformation uniaxiale, les voisinages des grains les plus chargés de l'agrégat sont le plus souvent nuisibles (*i.e.* ils augmentent la contrainte des grains qu'ils entourent) tandis qu'en glissement simple, les voisinages des grains les plus chargés ont plutôt tendance à diminuer la contrainte. L'effet du voisinage est plus prononcé dans les agrégats de 316L, probablement du fait de son anisotropie élastique plus prononcée que celle du Titane.
- * Les grains les plus chargés sont souvent de forme *Oblate* (45% à 67% des cas alors qu'ils ne représentent que 26% des grains dans les différents agrégats), de rapport de forme élevé ($k = 2.47$ à 3.93 contre 1.9 en moyenne dans les agrégats) et ont des voisins plus proches (0.05mm contre 0.15mm en moyenne). Par contre leurs voisinages ne semblent pas dotés de caractéristiques morphologiques remarquables.
- * Lorsque des carbures sont introduits dans une microstructure existante, leur morphologie est très dépendante de la méthode de croissance choisie. Du fait de leur petite taille, ils n'ont que peu de voisins et leur effet est donc très localisé. Toutefois, leur contrainte interne peut augmenter jusqu'à 24% du fait des grains alentours, et eux-mêmes peuvent générer des variations comprises entre -16.8% et +37.8% dans les grains dont ils sont les voisins.

6.2 Hypothèses et Limites de l'outil GNOME

L'outil GNOME s'est révélé utile pour la génération et l'analyse d'une grande quantité de données difficilement accessibles autrement. Pour autant, cet outil est basé sur des hypothèses simplificatrices et possède un certain nombre de limites qu'il convient de présenter clairement ici.

- * Par construction, GNOME est limité au cadre de l'élasticité linéaire. Par conséquent aucun phénomène non-linéaire ou de plasticité, même locale, ne peut être simulé ni pris en compte.
- * L'outil GNOME considère systématiquement l'agrégat comme macroscopiquement isotrope et homogène. Si ce n'est pas le cas, GNOME ne peut le détecter et produira des résultats erronés.
- * GNOME simule un agrégat au coeur de la matière, sans effets de surface. La méthode de génération actuelle ne permet pas non plus la création de bords périodiques.
- * GNOME n'est pas prévu nativement pour réaliser de l'homogénéisation. En effet, les propriétés effectives sont des données d'entrée dont il est nécessaire de disposer soit expérimentalement soit par homogénéisation.

- * Le principe d'additivité dans la loi de transition de l'Automate Cellulaire implique également l'hypothèse d'un cumul linéaire des effets de chaque voisin. Si cette hypothèse peut sembler comme allant de soit en élasticité, elle suppose que l'influence d'un voisin dans l'agrégat est la même que lorsqu'il est isolé avec le grain étudié dans un milieu effectif isotrope homogène.
- * L'outil GNOME suppose que l'OC et la morphologie du grain n'a pas d'importance sur l'effet de voisinage qu'il subit. Cela reste néanmoins à démontrer dans un contexte où le voisinage est désormais irrégulier et la morphologie très différente d'un grain à l'autre.
- * GNOME génère un agrégat qui est une simplification de la réalité : les joints de grains sont d'épaisseur nulle ; il n'y a que les grains et des inclusions (auxquelles ont attribué ici les propriétés des carbures), dont les formes sont toutes approximées par des sphéroïdes afin de satisfaire à l'EIM dans sa version actuellement implémentée dans l'outil GNOME. Si la représentativité est améliorée par rapport aux rangées d'octaèdres tronqués, le matériau n'est pas encore "réaliste".
- * Du fait de la construction par voxelisation de l'agrégat, GNOME se montre moins performant dès lors que plusieurs échelles d'hétérogénéités coexistent (par exemple des carbures de petite taille au sein d'un agrégat de grains bien plus gros). Soit les premiers possèdent une enveloppe "pixelisée", soit la modélisation de l'agrégat exige un nombre de voxels - et donc un temps de calcul - bien plus important, rabotant ainsi l'intérêt principal de GNOME.
- * Le caractère polyédrique des grains dans les agrégats de Voronoï générés dans cette thèse implique l'existence de concentrations de contraintes aux arêtes et plus encore aux sommets des grains, ce que l'approximation sphéroïdale ne peut reproduire - d'autant qu'un sphéroïde a par nature des produits d'inertie nuls. Si le réalisme de ces concentrations de contraintes peut être discuté, les simulations de l'outil GNOME seront néanmoins moins fiables au niveau des frontières de grains, particulièrement les joints triples (ou davantage) et les zones à la géométrie saillante.
- * Suite directe du point précédent : la méthode actuelle d'approximation sphéroïdale supprime l'information du troisième moment d'inertie et positionne le sphéroïde équivalent au niveau du germe du grain, ce qui pose problème pour les grains à croissance excentrée.
- * La méthode actuelle d'identification des voisins possède un biais pour les grains fortement éloignés de la forme sphérique, ce qui peut conduire à choisir des grains éloignés comme voisins et ignorer d'autres voisins pourtant plus proches.

6.3 Perspectives et Développements futurs

Malgré ses inévitables limitations, l'outil GNOME reste prometteur. Certaines de ses limitations ne sont d'ailleurs pas structurelles et pourraient être atténuées - voir supprimées - avec les développements adéquats.

- ★ Dans les présents travaux, le calcul des champs est effectué aux seuls centroïdes des grains. Un des axes d'amélioration les plus immédiats serait d'implanter une grille de mesure du champ local avec une fonction d'interpolation entre les points de mesure pour pouvoir produire le tenseur des contraintes et/ou des déformations en tout point de l'agrégat. Ce type de grille, appelé *constellation* afin de souligner qu'elle n'est pas forcément régulière, a d'ores et déjà été implantée (dans une version régulière) dans l'outil GNOME (annexe G). Néanmoins, une campagne de validation de son bon fonctionnement sera nécessaire avant de l'exploiter, notamment pour étudier les effets de voisinage sur l'hétérogénéité intragranulaire. Le développement d'une version irrégulière de cette constellation, capable de gérer plusieurs échelles de mesure (grain, carbure...), serait un atout pour mieux observer les variations de champ intragranulaires. C'est donc une perspective à court terme.
- ★ A moyen terme cette fois, l'utilisation de sphéroïdes et les approximations qu'ils engendrent doivent être questionnées. Une option pourrait être de revenir, peut-être partiellement, aux équations sous forme intégrale. Si le temps de calcul de l'EIM augmentera puisque devant passer par la résolution numérique d'intégrales elliptiques (mais le temps de calcul restera inférieur à une résolution par des méthodes en champs complets), il permettrait de passer de sphéroïdes à des ellipsoïdes quelconques avec trois moments d'inertie, permettant de mieux prendre en compte la morphologie des grains.
- ★ L'une des évolutions les plus prometteuses pour le GNOME est la possibilité - à moyen terme également - de fonctionner avec des agrégats macroscopiquement anisotropes. Les équations correspondantes sont effectivement disponibles dans les travaux de [Mura, 1987] et peuvent être incorporés dans l'outil GNOME au prix d'une soigneuse et exhaustive campagne de validation que la présente thèse ne pouvait réaliser dans les délais restants. Le GNOME propose en outre déjà la possibilité de créer des microstructures macroscopiquement texturées *via* une segmentation de type Johnson-Mehl Anisotrope - à noter que l'approximation sphéroïdale des grains serait par ailleurs mieux adaptée à des microstructures contenant des grains allongés qu'aux microstructures étudiées dans la présente thèse.
- ★ Dans une vision à long terme, une autre évolution envisageable serait de "boucler" l'outil GNOME afin de lui donner la capacité de calculer simultanément les paramètres effectifs de l'agrégat et non plus de les importer en tant que données d'entrée. Il s'agit ici de remplacer un milieu effectif "idéalisé" par un le milieu effectif "réel". En s'inspirant des approches autocohérentes, on pourrait envisager une résolution implicite où le tenseur de rigidité effectif serait une inconnue supplémentaire. Plusieurs itérations de la loi de transition de l'AC seraient alors nécessaire jusqu'à satisfaire un critère de convergence restant à définir.
- ★ Le point précédent a également des applications plus "techniques" à moyen terme avec la possibilité de lancer plusieurs itérations successives du calcul sur GNOME - la loi de transition utilisant le dernier état atteint par chaque cellule afin d'étudier l'influence du nombre d'itérations sur la précision du résultat. On pourrait aussi utiliser ce principe pour modéliser des phénomènes de viscoplasticité et de fluage

(bien que l'outil soit moins fiable en dehors de l'élasticité linéaire [Bretin et *al.*, 2020]). Le principe même de l'Automate Cellulaire se prête en effet particulièrement à ce genre de calculs et l'étude de l'évolution de l'effet de voisinage reste un sujet encore très peu abordé. A noter que la loi de transition pourrait être modifiée ou ses paramètres rendus dépendants de l'itération.

- ★ Toujours d'un point de vue "technique", à court terme, l'outil GNOME pourrait intégrer la solution du Balayage Radial de l'Enveloppe (BRE) afin d'améliorer l'identification des voisins, y compris pour les grains aux formes les plus complexes.
- ★ A moyen terme mais d'un point de vue "métallurgique" cette fois, l'ajout de phases ayant des propriétés très différentes (inclusion, carbures, cavités...) à la microstructure est une étape importante vers la création de microstructures plus réalistes. L'adjonction d'un matériau d'une autre nature ouvre en effet la voie à la construction d'agrégats bi- voire multiphasés, comme du titane avec des phases α et β ou un acier martensitique pourvu d'austénite résiduelle. Dans ce dernier cas, la faible rigidité relative et la petite taille des grains d'austénite par rapport aux lattes de martensite devraient créer un intense effet de voisinage dans ces grains dont la conséquence sur le champ local est encore mal connue et que l'outil GNOME devrait être en mesure d'éclairer.
- ★ Enfin, à long terme en "métallurgie", l'adjonction d'une nouvelle phase sur une microstructure existante permet également d'envisager de modéliser les joints de grains comme une véritable phase avec des propriétés matériaux et une interaction avec les grains et non simplement comme une frontière mathématique dépourvu d'épaisseur. Les possibilités qu'ouvre la prise en compte de l'existence des joints de grains sont très nombreuses, qu'il s'agisse d'améliorer la prédiction du champ local dans cette zone ou de s'intéresser aux mouvements de dislocations, à la croissance des fissures...

Annexes

Contents

A	Détails de calcul - EIM	158
A.1	Sphéroïde <i>Oblate</i>	158
A.2	Sphéroïde <i>Prolate</i>	161
B	Notes sur le positionnement spatial 3D et les relations d'orientation	164
B.1	Construction de la matrice de Rotation	164
B.2	Relations de Kurdjow-Sachs	166
B.3	Relations de Burgers	167
C	Etude de convergence EF et taille d'élément	168
D	Propriétés Matériau	170
E	Sensibilité de l'outil GNOME au nombre de grains, seconde étude	171
F	Création et insertion d'une seconde phase minoritaire	173
G	Premier développement sur la prise en compte d'une grille de mesure	180

A Détails de calcul - EIM

A.1 Sphéroïde *Oblate*

A.1.1 Expression des λ , λ_i , λ_{ij}

$$\begin{cases} \beta_0 &= a_3^2 + a_1^2 - (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \\ \gamma_0 &= a_3^2 a_1^2 - a_3^2 (x_1^2 + x_2^2) - a_1^2 x_3^2 \\ \lambda &= \frac{1}{2}(-\beta_0 + \sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}) \end{cases} \quad (7.1)$$

$$\begin{cases} \lambda_{,1} &= x_1 \left[\frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_3^2 - a_1^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} + 1 \right] \\ \lambda_{,2} &= x_2 \left[\frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_3^2 - a_1^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} + 1 \right] \\ \lambda_{,3} &= x_3 \left[\frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} + 1 \right] \end{cases} \quad (7.2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{,11} = \frac{(3x_1^2+x_2^2+x_3^2-a_1^2+a_3^2)}{\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0}} - 2x_1^2 \frac{(x_1^2+x_2^2+x_3^2-a_1^2+a_3^2)^2}{(\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0})^3} + 1 \\ \lambda_{,21} = \lambda_{,12} = \left[1 - \frac{(x_1^2+x_2^2+x_3^2-a_1^2+a_3^2)^2}{(\beta_0^2-4\gamma_0)}\right] \frac{2x_1x_2}{\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0}} \\ \lambda_{,31} = \lambda_{,13} = \left[1 - \frac{(x_1^2+x_2^2+x_3^2-a_1^2+a_3^2)(x_1^2+x_2^2+x_3^2+a_1^2-a_3^2)}{(\beta_0^2-4\gamma_0)}\right] \frac{2x_1x_3}{\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0}} \\ \\ \lambda_{,22} = \frac{(x_1^2+3x_2^2+x_3^2-a_1^2+a_3^2)}{\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0}} - 2x_2^2 \frac{(x_1^2+x_2^2+x_3^2-a_1^2+a_3^2)^2}{(\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0})^3} + 1 \\ \lambda_{,32} = \lambda_{,23} = \left[1 - \frac{(x_1^2+x_2^2+x_3^2-a_1^2+a_3^2)(x_1^2+x_2^2+x_3^2+a_1^2-a_3^2)}{(\beta_0^2-4\gamma_0)}\right] \frac{2x_2x_3}{\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0}} \\ \\ \lambda_{,33} = \frac{(x_1^2+x_2^2+3x_3^2+a_1^2-a_3^2)}{\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0}} - 2x_3^2 \frac{(x_1^2+x_2^2+x_3^2+a_1^2-a_3^2)^2}{(\sqrt{\beta_0^2-4\gamma_0})^3} + 1 \end{array} \right. \quad (7.3)$$

A.1.2 Expression des $B_{k,i}$, $B_{k,ij}$

$$\left\{ \begin{array}{l} b = \sqrt{\frac{(a_3^2+\lambda)}{(a_1^2+\lambda)}} \\ b_{,\lambda} = \frac{1-b^2}{2b(a_1^2+\lambda)} \\ b_{,\lambda\lambda} = \frac{(\frac{b^2-1}{b} - \frac{(1-b^2)^2}{4b^3})}{(a_1^2+\lambda)^2} \end{array} \right. \quad (7.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} c = \sqrt{\frac{(a_1^2-a_3^2)}{(a_1^2+\lambda)}} \\ c_{,\lambda} = \frac{-c}{2(a_1^2+\lambda)} \\ c_{,\lambda\lambda} = \frac{3c}{4(a_1^2+\lambda)^2} \end{array} \right. \quad (7.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{1,b} = \frac{2\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{(a_1^2-a_3^2)^3}} \left(\frac{-1}{\sqrt{1-b^2}} - c\right) \\ B_{1,c} = \frac{2\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{(a_1^2-a_3^2)^3}} (-b) \\ B_{1,bb} = \frac{2\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{(a_1^2-a_3^2)^3}} \left(\frac{-b}{\sqrt{1-b^2^3}}\right) \\ B_{1,bc} = \frac{2\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{(a_1^2-a_3^2)^3}} (-1) \end{array} \right. \quad (7.6)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{3,b} = \frac{4\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{(a_1^2-a_3^2)^3}} \left(\frac{-c}{b^2} + \frac{1}{\sqrt{1-b^2}}\right) \\ B_{3,c} = \frac{4\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{(a_1^2-a_3^2)^3}} \left(\frac{1}{b}\right) \\ B_{3,bb} = \frac{4\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{(a_1^2-a_3^2)^3}} \left(\frac{2c}{b^3} + \frac{b}{\sqrt{1-b^2^3}}\right) \\ B_{3,bc} = \frac{4\pi a_1^2 a_3}{\sqrt{(a_1^2-a_3^2)^3}} \left(\frac{-1}{b^2}\right) \end{array} \right. \quad (7.7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{2,i} = B_{1,i} = (B_{1,b} b_{,\lambda} + B_{1,c} c_{,\lambda}) \lambda_{,i} \\ B_{3,i} = (B_{3,b} b_{,\lambda} + B_{3,c} c_{,\lambda}) \lambda_{,i} \\ B_{2,ij} = B_{1,ij} = (B_{1,bb} (b_{,\lambda})^2 + 2B_{1,bc} b_{,\lambda} c_{,\lambda} + B_{1,b} b_{,\lambda\lambda} + B_{1,c} c_{,\lambda\lambda}) \lambda_{,i} \lambda_{,j} + \\ (B_{1,b} b_{,\lambda} + B_{1,c} c_{,\lambda}) \lambda_{,ij} \\ B_{3,ij} = (B_{3,bb} (b_{,\lambda})^2 + 2B_{3,bc} b_{,\lambda} c_{,\lambda} + B_{3,b} b_{,\lambda\lambda} + B_{3,c} c_{,\lambda\lambda}) \lambda_{,i} \lambda_{,j} + \\ (B_{3,b} b_{,\lambda} + B_{3,c} c_{,\lambda}) \lambda_{,ij} \end{array} \right. \quad (7.8)$$

A.1.3 Expression des $B_{kl,i}$, $B_{kl,ij}$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{13} = B_{23} = B_{31} = B_{32} = \frac{B_1 - B_3}{a_3^2 - a_1^2} \\ B_{13,i} = B_{23,i} = B_{31,i} = B_{32,i} = \frac{B_{1,i} - B_{3,i}}{a_3^2 - a_1^2} \\ B_{13,ij} = B_{23,ij} = B_{31,ij} = B_{32,ij} = \frac{B_{1,ij} - B_{3,ij}}{a_3^2 - a_1^2} \end{array} \right. \quad (7.9)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta = \frac{\pi a_3 a_1^2}{\sqrt{a_3^2 + \lambda} (a_1^2 + \lambda)^2} \\ \beta_{,\lambda} = -\beta \left[\frac{1}{2(a_3^2 + \lambda)} + \frac{2}{(a_1^2 + \lambda)} \right] \\ \beta_{,\lambda\lambda} = \beta \left[\frac{3}{4(a_3^2 + \lambda)^2} + \frac{2}{(a_3^2 + \lambda)(a_1^2 + \lambda)} + \frac{6}{(a_1^2 + \lambda)^2} \right] \end{array} \right. \quad (7.10)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = \frac{4\pi a_3 a_1^2}{3(a_3^2 + \lambda)^{\frac{3}{2}} (a_1^2 + \lambda)} \\ \alpha_{,\lambda} = -\alpha \left[\frac{1}{(a_1^2 + \lambda)} + \frac{3}{2(a_3^2 + \lambda)} \right] \\ \alpha_{,\lambda\lambda} = \alpha \left[\frac{15}{4(a_3^2 + \lambda)^2} + \frac{3}{(a_3^2 + \lambda)(a_1^2 + \lambda)} + \frac{2}{(a_1^2 + \lambda)^2} \right] \end{array} \right. \quad (7.11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{11} = B_{12} = B_{21} = B_{22} = \beta - \frac{1}{4} B_{23} \\ B_{11,i} = B_{12,i} = B_{21,i} = B_{22,i} = \beta_{,\lambda} \lambda_{,i} - \frac{1}{4} B_{23,i} \\ B_{11,ij} = B_{12,ij} = B_{21,ij} = B_{22,ij} = \beta_{,\lambda\lambda} \lambda_{,i} \lambda_{,j} + \beta_{,\lambda} \lambda_{,ij} - \frac{1}{4} B_{23,ij} \end{array} \right. \quad (7.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{33} = \alpha - \frac{2}{3} B_{31} \\ B_{33,i} = \alpha_{,\lambda} \lambda_{,i} - \frac{2}{3} B_{31,i} \\ B_{33,ij} = \alpha_{,\lambda\lambda} \lambda_{,i} \lambda_{,j} + \alpha_{,\lambda} \lambda_{,ij} - \frac{2}{3} B_{31,ij} \end{array} \right. \quad (7.13)$$

A.2 Sphéroïde *Prolate*

A.2.1 Expression des λ , $\lambda_{,i}$, $\lambda_{,ij}$

$$\begin{cases} \beta_0 &= a_1^2 + a_2^2 - (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \\ \gamma_0 &= a_1^2 a_2^2 - a_1^2(x_2^2 + x_3^2) - a_2^2 x_1^2 \\ \lambda &= \frac{1}{2}(-\beta_0 + \sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}) \end{cases} \quad (7.14)$$

$$\begin{cases} \lambda_{,1} &= x_1 \left[\frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - a_1^2 - a_2^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} + 1 \right] \\ \lambda_{,2} &= x_2 \left[\frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_2^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} + 1 \right] \\ \lambda_{,3} &= x_3 \left[\frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} + 1 \right] \end{cases} \quad (7.15)$$

$$\begin{cases} \lambda_{,11} &= \frac{(3x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - a_1^2 + a_3^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} - 2x_1^2 \frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - a_1^2 + a_3^2)^2}{(\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0})^3} + 1 \\ \lambda_{,21} &= \lambda_{,12} = \left[1 - \frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - a_1^2 + a_3^2)(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)}{(\beta_0^2 - 4\gamma_0)} \right] \frac{2x_1 x_2}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} \\ \lambda_{,31} &= \lambda_{,13} = \left[1 - \frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - a_1^2 + a_3^2)(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)}{(\beta_0^2 - 4\gamma_0)} \right] \frac{2x_1 x_3}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} \\ \lambda_{,22} &= \frac{(x_1^2 + 3x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} - 2x_2^2 \frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)^2}{(\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0})^3} + 1 \\ \lambda_{,32} &= \lambda_{,23} = \left[1 - \frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)^2}{(\beta_0^2 - 4\gamma_0)} \right] \frac{2x_2 x_3}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} \\ \lambda_{,33} &= \frac{(x_1^2 + x_2^2 + 3x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)}{\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0}} - 2x_3^2 \frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + a_1^2 - a_3^2)^2}{(\sqrt{\beta_0^2 - 4\gamma_0})^3} + 1 \end{cases} \quad (7.16)$$

A.2.2 Expression des $B_{k,i}$, $B_{k,ij}$

$$\begin{cases} b &= \sqrt{\frac{(a_1^2 + \lambda)}{(a_3^2 + \lambda)}} \\ b_{,\lambda} &= \frac{1 - b^2}{2b(a_3^2 + \lambda)} \\ b_{,\lambda\lambda} &= \frac{(b - \frac{1}{b} - \frac{(1 - b^2)^2}{4b^3})}{(a_3^2 + \lambda)^2} \end{cases} \quad (7.17)$$

$$\begin{cases} c &= \sqrt{\frac{(a_1^2 - a_3^2)}{(a_3^2 + \lambda)}} \\ c_{,\lambda} &= \frac{-c}{2(a_3^2 + \lambda)} \\ c_{,\lambda\lambda} &= \frac{3c}{4(a_3^2 + \lambda)^2} \end{cases} \quad (7.18)$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} B_{1,b} & = & \frac{4 \pi a_1 a_3^2}{\sqrt{(a_1^2 - a_3^2)^3}} \left(\frac{1}{\sqrt{b^2 - 1}} + \frac{c}{b^2} \right) \\ B_{1,c} & = & \frac{4 \pi a_1 a_3^2}{\sqrt{(a_1^2 - a_3^2)^3}} \left(\frac{-1}{b} \right) \\ B_{1,bb} & = & \frac{4 \pi a_1 a_3^2}{\sqrt{(a_1^2 - a_3^2)^3}} (-1) \left(\frac{b}{\sqrt{(b^2 - 1)^3}} + \frac{2c}{b^3} \right) \\ B_{1,bc} & = & \frac{4 \pi a_1 a_3^2}{\sqrt{(a_1^2 - a_3^2)^3}} \left(\frac{1}{b^2} \right) \end{array} \right. \quad (7.19)$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} B_{2,b} & = & \frac{2 \pi a_1 a_3^2}{\sqrt{(a_1^2 - a_3^2)^3}} \left(c - \frac{1}{\sqrt{b^2 - 1}} \right) \\ B_{2,c} & = & \frac{2 \pi a_1 a_3^2}{\sqrt{(a_1^2 - a_3^2)^3}} (b) \\ B_{2,bb} & = & \frac{2 \pi a_1 a_3^2}{\sqrt{(a_1^2 - a_3^2)^3}} \left(\frac{b}{\sqrt{(b^2 - 1)^3}} \right) \\ B_{2,bc} & = & \frac{2 \pi a_1 a_3^2}{\sqrt{(a_1^2 - a_3^2)^3}} \end{array} \right. \quad (7.20)$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} B_{3,i} & = & B_{1,i} = (B_{1,b} b_{,\lambda} + B_{1,c} c_{,\lambda}) \lambda_{,i} \\ & & B_{2,i} = (B_{2,b} b_{,\lambda} + B_{2,c} c_{,\lambda}) \lambda_{,i} \\ & & B_{1,ij} = (B_{1,bb} (b_{,\lambda})^2 + 2B_{1,bc} b_{,\lambda} c_{,\lambda} + B_{1,b} b_{,\lambda\lambda} + B_{1,c} c_{,\lambda\lambda}) \lambda_{,i} \lambda_{,j} + \\ & & (B_{1,b} b_{,\lambda} + B_{1,c} c_{,\lambda}) \lambda_{,ij} \\ & & B_{3,ij} = B_{2,ij} = (B_{2,bb} (b_{,\lambda})^2 + 2B_{2,bc} b_{,\lambda} c_{,\lambda} + B_{2,b} b_{,\lambda\lambda} + B_{2,c} c_{,\lambda\lambda}) \lambda_{,i} \lambda_{,j} + \\ & & (B_{2,b} b_{,\lambda} + B_{2,c} c_{,\lambda}) \lambda_{,ij} \end{array} \right. \quad (7.21)$$

A.2.3 Expression des $B_{kl,i}$, $B_{kl,ij}$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} B_{13} & = & B_{21} = B_{31} = B_{12} = \frac{B_2 - B_1}{a_1^2 - a_3^2} \\ B_{13,i} & = & B_{21,i} = B_{31,i} = B_{12,i} = \frac{B_{2,i} - B_{1,i}}{a_1^2 - a_3^2} \\ B_{13,ij} & = & B_{21,ij} = B_{31,ij} = B_{12,ij} = \frac{B_{2,ij} - B_{1,ij}}{a_1^2 - a_3^2} \end{array} \right. \quad (7.22)$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \alpha & = & \frac{2\pi a_3^2 a_1}{(a_3^2 + \lambda) (\sqrt{a_1^2 + \lambda})^3} \\ \alpha_{,\lambda} & = & -\alpha \left[\frac{3}{2(a_1^2 + \lambda)} + \frac{1}{(a_3^2 + \lambda)} \right] \\ \alpha_{,\lambda\lambda} & = & \alpha \left[\frac{15}{4(a_1^2 + \lambda)^2} + \frac{3}{(a_1^2 + \lambda)(a_3^2 + \lambda)} + \frac{2}{(a_3^2 + \lambda)^2} \right] \end{array} \right. \quad (7.23)$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \beta & = & \frac{\pi a_1 a_3^2}{(\sqrt{a_1^2 + \lambda}) (a_3^2 + \lambda)^2} \\ \beta_{,\lambda} & = & -\beta \left[\frac{1}{2(a_1^2 + \lambda)} + \frac{2}{(a_3^2 + \lambda)} \right] \\ \beta_{,\lambda\lambda} & = & \beta \left[\frac{3}{4(a_1^2 + \lambda)^2} + \frac{2}{(a_1^2 + \lambda)(a_3^2 + \lambda)} + \frac{6}{(a_3^2 + \lambda)^2} \right] \end{array} \right. \quad (7.24)$$

$$\left\{ \begin{array}{lcl} B_{11} & = & \frac{2}{3}(\alpha - B_{12}) \\ B_{11,i} & = & \frac{2}{3}(\alpha_{,\lambda}\lambda_{,i} - B_{12,i}) \\ B_{11,ij} & = & \frac{2}{3}(\alpha_{,\lambda\lambda}\lambda_{,i}\lambda_{,j} + \alpha_{,\lambda}\lambda_{,ij} - B_{12,ij}) \end{array} \right. \quad (7.25)$$

$$\left\{ \begin{array}{lclclcl} B_{33} & = & B_{23} & = & B_{32} & = & B_{22} & = & \beta - \frac{1}{4}B_{12} \\ B_{33,i} & = & B_{23,i} & = & B_{32,i} & = & B_{22,i} & = & \beta_{,\lambda}\lambda_{,i} - \frac{1}{4}B_{12,i} \\ B_{33,ij} & = & B_{23,ij} & = & B_{32,ij} & = & B_{22,ij} & = & \beta_{,\lambda\lambda}\lambda_{,i}\lambda_{,j} + \beta_{,\lambda}\lambda_{,ij} - \frac{1}{4}B_{12,ij} \end{array} \right. \quad (7.26)$$

B Notes sur le positionnement spatial 3D et les relations d'orientation

B.1 Construction de la matrice de Rotation

Soit X_i avec $i \in \{1, 2, 3\}$ un système d'axes fixe, orthonormé direct, assigné à un référentiel global. La matrice de rotation permet de passer de ce repère à un repère local x_i par le biais de trois rotations correspondant aux trois angles d'Euler $[\psi \ \theta \ \varphi]$, dits respectivement, de *précession*, de *nutation* et de *rotation propre*. La convention utilisée est celle de Bunge, la plus répandue, et s'organise comme suit :

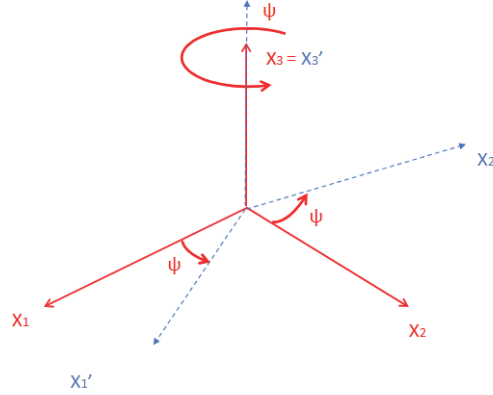


FIGURE 7.1 – Rotation de précession autour de l'axe X_3 d'amplitude ψ

Par souci de lisibilité, les cosinus et sinus seront notés comme dans la sous-section 3.2.1 du chapitre 3, c'est-à-dire : $\cos(\psi) = c_\psi$, $\sin(\theta) = s_\theta$...

$$\begin{cases} X'_1 &= c_\psi X_1 + s_\psi X_2 \\ X'_2 &= -s_\psi X_1 + c_\psi X_2 \\ X'_3 &= X_3 \end{cases} \quad (7.27)$$

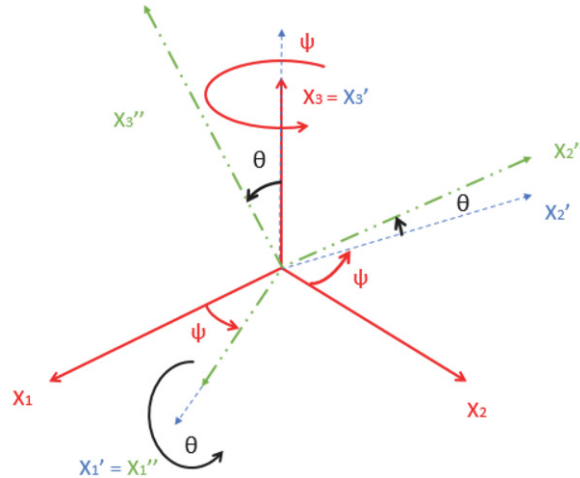


FIGURE 7.2 – Rotation de nutation autour de l'axe X'_1 d'amplitude θ

$$\begin{cases} X_1'' = X_1' \\ X_2'' = c_\theta X_2' + s_\theta X_3' \\ X_3'' = -s_\theta X_2' + c_\theta X_3' \end{cases} \quad (7.28)$$

Soit :

$$\begin{cases} X_1'' = c_\psi X_1 + s_\psi X_2 \\ X_2'' = c_\theta (-s_\psi X_1 + c_\psi X_2) + s_\theta X_3 \\ X_3'' = -s_\theta (-s_\psi X_1 + c_\psi X_2) + c_\theta X_3 \end{cases} \quad (7.29)$$

$$\begin{cases} X_1'' = c_\psi X_1 + s_\psi X_2 \\ X_2'' = -s_\psi c_\theta X_1 + c_\psi c_\theta X_2 + s_\theta X_3 \\ X_3'' = s_\psi s_\theta X_1 - c_\psi s_\theta X_2 + c_\theta X_3 \end{cases} \quad (7.30)$$

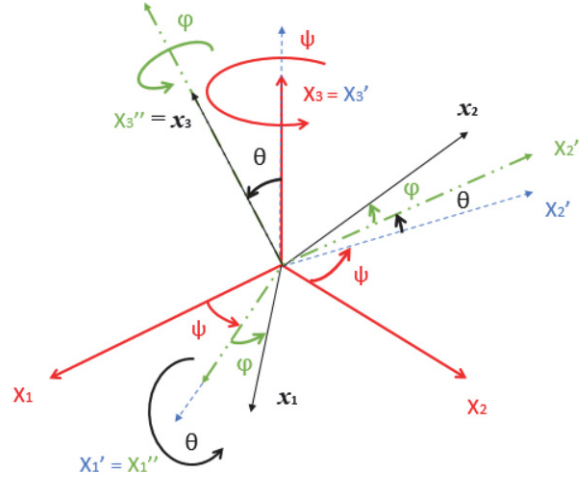


FIGURE 7.3 – Rotation propre autour de l'axe X_3'' d'amplitude φ

$$\begin{cases} x_1 = c_\varphi X_1'' + s_\varphi X_2'' \\ x_2 = -s_\varphi X_1'' + c_\varphi X_2'' \\ x_3 = X_3'' \end{cases} \quad (7.31)$$

Soit :

$$\begin{cases} x_1 = c_\varphi (c_\psi X_1 + s_\psi X_2) + s_\varphi (-s_\psi c_\theta X_1 + c_\psi c_\theta X_2 + s_\theta X_3) \\ x_2 = -s_\varphi (c_\psi X_1 + s_\psi X_2) + c_\varphi (-s_\psi c_\theta X_1 + c_\psi c_\theta X_2 + s_\theta X_3) \\ x_3 = s_\psi s_\theta X_1 - c_\psi s_\theta X_2 + c_\theta X_3 \end{cases} \quad (7.32)$$

$$\begin{cases} x_1 = [c_\psi c_\varphi - s_\psi c_\theta s_\varphi] X_1 + [s_\psi c_\varphi + c_\psi c_\theta s_\varphi] X_2 + [s_\theta s_\varphi] X_3 \\ x_2 = [-c_\psi s_\varphi - s_\psi c_\theta c_\varphi] X_1 + [c_\psi c_\theta c_\varphi - s_\psi s_\varphi] X_2 + [s_\theta c_\varphi] X_3 \\ x_3 = [s_\psi s_\theta] X_1 + [-c_\psi s_\theta] X_2 + [c_\theta] X_3 \end{cases} \quad (7.33)$$

Ces équations permettent d'exprimer le repère local en fonction du repère global et d'obtenir directement la matrice associée. Pour obtenir la matrice de rotation du repère global vers le repère local, il suffit d'inverser la matrice. Sachant que les matrices de rotation sont des matrices orthonormées, l'inverse est alors égal à la transposée et on retombe sur la matrice de l'équation 3.20 (page 48), de la sous-section 3.2.1 du chapitre 3.

B.2 Relations de Kurdjumow-Sachs

Dans le Fer (de structure cristallographique CC), pour un grain avec une orientation cristalline donnée, un grain adjacent a un nombre limité de possibilités d'orientations cristallographiques en fonction de l'orientation de ses plans et directions de glissement : ce sont les relations de Kurdjumow-Sachs [Kurdjumow & Sachs, 1930 ; Morito et *al.*, 2003] :

Variant n°	Plans parallèles	dir. Parallèles [γ] // [α']	Rotation par rapport au variant n°1	
			Axe de rotation	Angle de
1		$[\bar{1}01] // [\bar{1}\bar{1}1]$	—	—
2	$(111)\gamma$	$[\bar{1}01] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.5774 ; -0.5774 ; 0.5774]$	60.00
3	//	$[01\bar{1}] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.0 ; -0.7071 ; -0.7071]$	60.00
4	$(011)\alpha'$	$[01\bar{1}] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.0 ; 0.7071 ; 0.7071]$	10.53
5		$[1\bar{1}0] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.0 ; 0.7071 ; 0.7071]$	60.00
6		$[1\bar{1}0] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.0 ; -0.7071 ; -0.7071]$	49.47
7		$[10\bar{1}] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.5774 ; -0.5774 ; 0.5774]$	49.47
8	$(1\bar{1}1)\gamma$	$[10\bar{1}] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.5774 ; -0.5774 ; 0.5774]$	10.53
9	//	$[\bar{1}\bar{1}0] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.1862 ; 0.7666 ; 0.6145]$	50.51
10	$(011)\alpha'$	$[\bar{1}\bar{1}0] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.4904 ; -0.4625 ; 0.7387]$	50.51
11		$[011] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.3543 ; -0.9329 ; -0.0650]$	14.88
12		$[011] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.3568 ; -0.7136 ; 0.6029]$	57.21
13		$[0\bar{1}1] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.9329 ; 0.3543 ; 0.0650]$	14.88
14	$(\bar{1}11)\gamma$	$[0\bar{1}1] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.7387 ; 0.4625 ; -0.4904]$	50.51
15	//	$[\bar{1}0\bar{1}] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.2461 ; -0.6278 ; -0.7384]$	57.21
16	$(011)\alpha'$	$[\bar{1}0\bar{1}] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.6589 ; 0.6589 ; 0.3628]$	20.61
17		$[110] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.6589 ; 0.3628 ; -0.6589]$	51.73
18		$[110] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.3022 ; -0.6255 ; -0.7193]$	47.11
19		$[\bar{1}\bar{1}0] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.6145 ; 0.1862 ; -0.7666]$	50.51
20	$(11\bar{1})\gamma$	$[\bar{1}\bar{1}0] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.3568 ; -0.6029 ; -0.7136]$	57.21
21	//	$[0\bar{1}\bar{1}] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.9551 ; 0.0 ; -0.2962]$	20.61
22	$(011)\alpha'$	$[0\bar{1}\bar{1}] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.7193 ; 0.3022 ; -0.6255]$	47.11
23		$[101] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[-0.7384 ; -0.2461 ; 0.6278]$	57.21
24		$[101] // [\bar{1}\bar{1}1]$	$[0.9121 ; 0.41 ; 0.0]$	21.06

B.3 Relations de Burgers

De la même façon, les grains de phase α dans le Titane n'ont normalement pas d'orientations cristallographiques indépendantes. Elles sont liées à l'orientation cristallographique du grain β dont les grains α sont issus et il existe douze configurations possibles pour une orientation (d'ex-)grain β donnée [Burgers, 1934 ; Martin, 2012] :

Variant n°	Relations d'épitaxie		Angles d'Euler [ψ θ φ]
	Plans Parallèles	dir. Parallèles	
1	$(110)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[-45^\circ ; -90^\circ ; -90^\circ]$
2	$(110)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}11]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[-45^\circ ; 90^\circ ; 90^\circ]$
3	$(1\bar{1}0)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[45^\circ ; 90^\circ ; 90^\circ]$
4	$(1\bar{1}0)_\beta // (0001)_\alpha$	$[111]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[45^\circ ; -90^\circ ; -90^\circ]$
5	$(101)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[-90^\circ ; 135^\circ ; 0^\circ]$
6	$(101)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}11]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[90^\circ ; 45^\circ ; 0^\circ]$
7	$(\bar{1}01)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[-90^\circ ; 45^\circ ; 0^\circ]$
8	$(\bar{1}01)_\beta // (0001)_\alpha$	$[111]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[90^\circ ; 135^\circ ; 0^\circ]$
9	$(011)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}\bar{1}1]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[0^\circ ; 135^\circ ; 0^\circ]$
10	$(011)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}11]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[180^\circ ; 45^\circ ; 0^\circ]$
11	$(0\bar{1}1)_\beta // (0001)_\alpha$	$[111]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[0^\circ ; 45^\circ ; 0^\circ]$
12	$(0\bar{1}1)_\beta // (0001)_\alpha$	$[\bar{1}11]_\beta // [11\bar{2}0]_\alpha$	$[0^\circ ; -135^\circ ; 180^\circ]$

C Etude de convergence EF et taille d'élément

Une étude de convergence a été menée sur un des cas les plus critiques que nous pouvons modéliser en configuration isotrope : une cavité sphéroïdale *Oblate* de rapport de forme $k = 10$, chargée en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ sur le plan $(X_1; X_2)$, sans orientation spatiale, tel qu'illustré figure 7.4a.

Une autre étude de convergence a été menée en configuration anisotrope avec un sphéroïde *Prolate* de rapport de forme $k = 5$ soumis à une déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$, sans orientation spatiale et avec une orientation cristallographique $OC = [-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$ pour maximiser le contraste de module d'Young sur la direction de chargement [Bretin et al. , 2019] (voir schéma figure 7.5a) pour déterminer la taille optimale des éléments à utiliser.

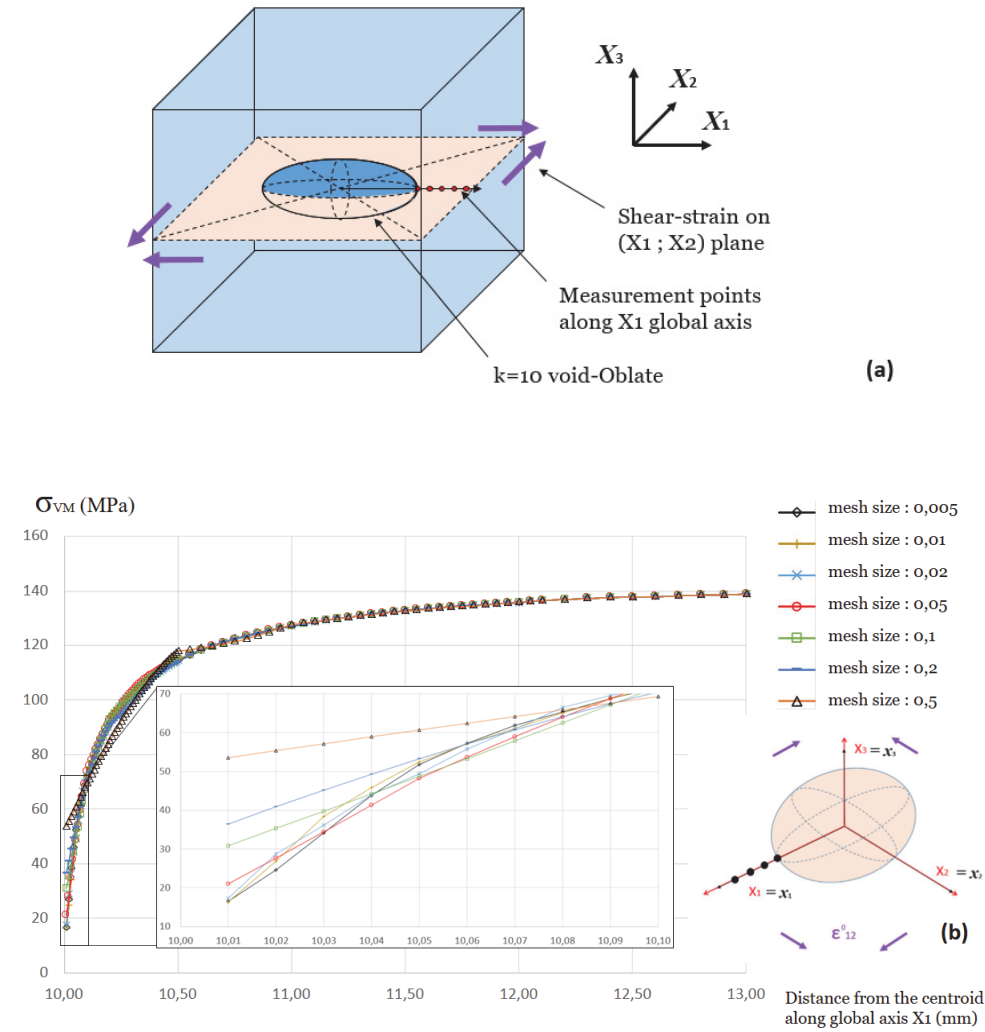


FIGURE 7.4 – Etude de convergence (schéma (a) ; graphe (b)) dans le cas d'un sphéroïde *Oblate* (cavité) en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$. Les tailles sont données en mm

Sur la figure 7.4, un *Oblate*-cavité non spatialement orienté est simulé par EF avec différentes tailles d'élément. Il n'y a pas de réelle variation le long du chemin de mesure pour une taille d'élément comprise entre 0.005mm et 0.02mm, c'est donc cette dernière taille qui est retenue pour notre simulation de validation (écart relatif maximal ponctuel de 7% entre les deux tailles).

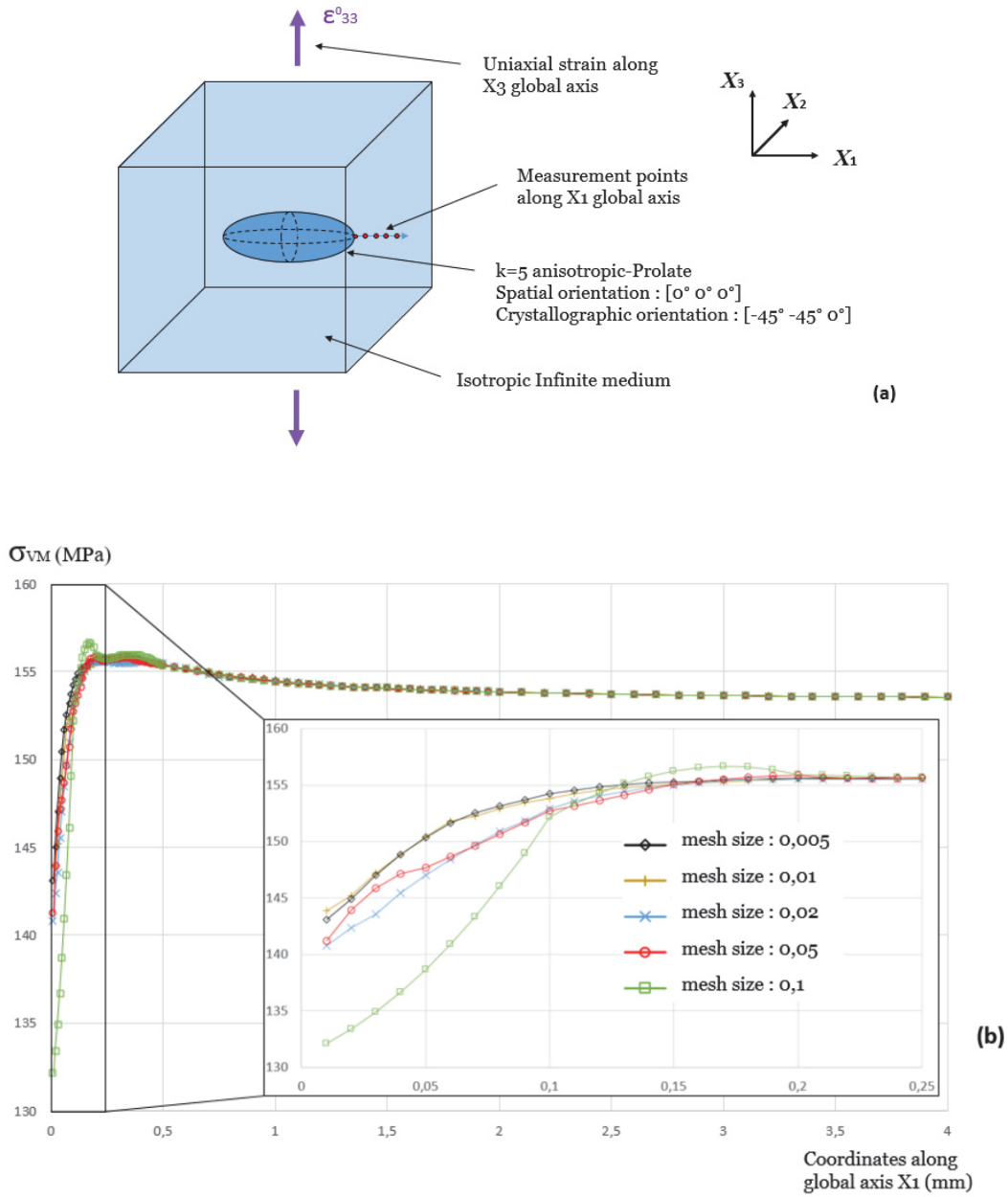


FIGURE 7.5 – Etude de convergence (schéma (a) ; graphe (b)) dans le cas d'un *Prolate* anisotrope chargé en déformation uniaxiale tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$. Les tailles sont données en mm

Sur la figure 7.5, l'inclusion *Prolate* possède une orientation cristallographique (voir chapitre 3, sous-section 3.5.1 pour plus de détails) est simulée par EF avec différentes tailles d'élément. Il n'y a pas de réelle variation le long du chemin de mesure pour une taille d'élément comprise entre 0.005mm et 0.01mm, c'est donc cette dernière taille qui est retenue pour notre simulation de validation (écart relatif maximal de 0.5% entre les deux tailles).

D Propriétés Matériau

Dans cette annexe sont rappelés et/ou explicités les tenseurs et constantes mécaniques utilisés pour les différents matériaux étudiés dans le manuscrit, en l'occurrence le 316L et le Titane.

Soit $\mathbb{C}_{c, 316L}$ le tenseur de rigidité du 316L [Guilhem, 2011] exprimé dans le repère de la maille cristalline $\{c_1, c_2, c_3\}$, avec la notation de Mandel [Bornert et *al.*, 2001 ; Bannon, 2018] identifiée par le symbole $\hat{\hat{\mathbb{C}}}$:

$$\hat{\hat{\mathbb{C}}}_{c, 316L} = \begin{bmatrix} 197 & 125 & 125 & 0 & 0 & 0 \\ 125 & 197 & 125 & 0 & 0 & 0 \\ 125 & 125 & 197 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \times 122 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \times 122 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \times 122 \end{bmatrix} \quad (\text{toutes valeurs en GPa}) \quad (7.34)$$

Soit $\mathbb{C}_{c, Ti \alpha}$ le tenseur de rigidité du Titane α [Simmons & Wang, 1971] exprimé dans le repère de la maille cristalline $\{c_1, c_2, c_3\}$, également avec la notation de Mandel :

$$\hat{\hat{\mathbb{C}}}_{c, Ti \alpha} = \begin{bmatrix} 162.4 & 92 & 69 & 0 & 0 & 0 \\ 92 & 162.4 & 69 & 0 & 0 & 0 \\ 69 & 69 & 180.7 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \times 46.7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \times 46.7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \times 46.7 \end{bmatrix} \quad (\text{toutes valeurs en GPa}) \quad (7.35)$$

Soient respectivement E_{316L}^{eff} , E_{Ti}^{eff} , ν_{Ti}^{eff} et ν_{Ti}^{eff} les modules d'Young et coefficients de Poissons des agrégats homogénéisés de 316L et de Titane α tels que calculés par [Bretin, 2020] dans sa thèse et repris pour les applications et vérification du modèle de Bretin-EIM puis de l'outil GNOME :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} E_{316L}^{eff} & = & 196.432 \text{ GPa} \\ E_{Ti}^{eff} & = & 114.74 \text{ GPa} \\ \nu_{316L}^{eff} & = & 0.28054 \\ \nu_{Ti}^{eff} & = & 0.3217 \end{array} \right.$$

E Sensibilité de l'outil GNOME au nombre de grains, seconde étude

Dans la sous-section 4.3.1 du chapitre 4, on cherche à estimer le nombre minimal de grains pour que la variabilité des moyennes des composantes du champ local soit faible d'une distribution à l'autre en partant du principe que la variabilité pour un agrégat de 686 grains est satisfaisante.

On rappelle que des agrégats de 50, 100, 150, 200, 300, 400, 500, 600 et 686 grains ont été générés. Pour chaque agrégat, dix distributions aléatoires d'OC ont été générées. Pour chaque agrégat et chaque distribution, deux chargements ont été considérés (déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ et glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$). Pour chaque agrégat, chaque chargement et chaque distribution la moyenne arithmétique $\sigma_{ij, moy}$ de chaque composante de contrainte σ_{ij} du champ local a été calculée. La moyenne arithmétique des $\sigma_{ij, moy}$ (représentée par un losange blanc) et l'écart-type associé ont été calculés.

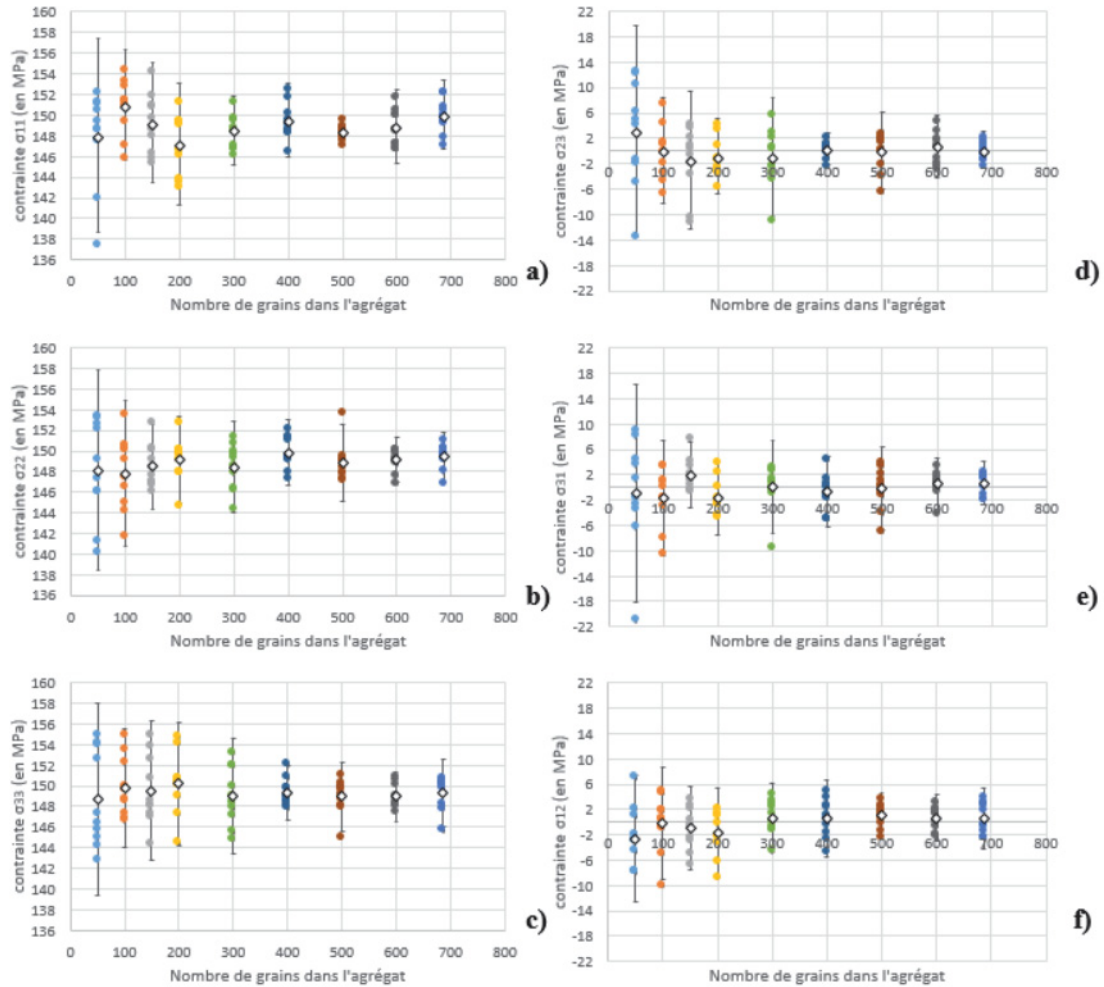


FIGURE 7.6 – moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$)

Les résultats obtenus pour des tailles d'agrégat de 50 à 300 grains n'ont pas été régénérés car les figures 4.11 et 4.12 montrent bien que la variabilité obtenue pour ces tailles d'agrégat n'est pas satisfaisante. Toutefois, afin de conforter l'estimation effectuée dans la sous-section 4.3.1, dix autres séries de distributions d'OC ont été testées pour les agrégats de 400, 500 et 600 grains. Les figures 7.6 (déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) et 7.7 (glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$) montrent les nouveaux résultats obtenus pour les agrégats à 400, 500 et 600 grains. Les résultats présentés sur les figures 4.11 et 4.12 pour les autres tailles d'agrégat sont reportés pour mémoire. Les morphologies d'agrégats sont identiques à celles utilisées dans la sous-section 4.3.1. Le rayon cadastral considéré ici est $\mathcal{R}_c = 2.5$ et le matériau, comme dans la sous-section 4.3.1, est du 316L.

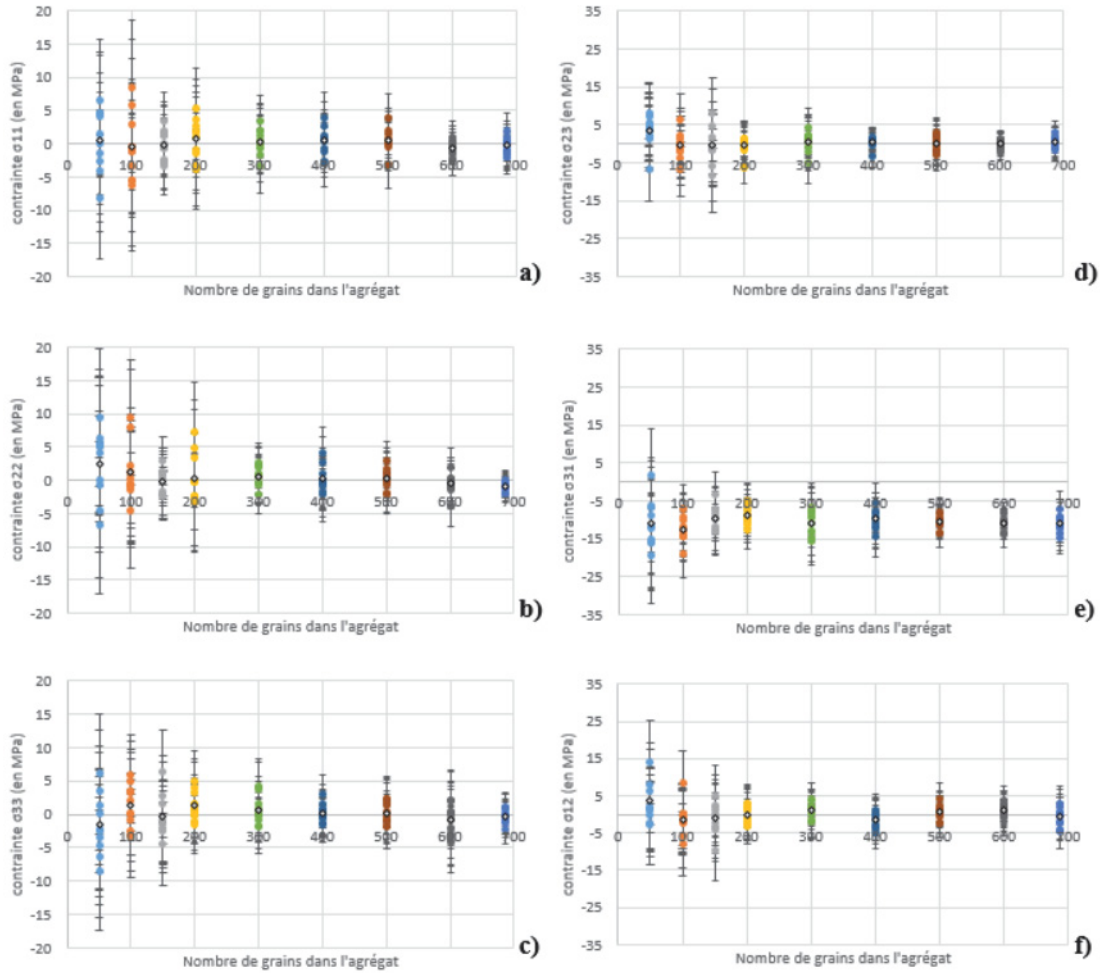


FIGURE 7.7 – moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$)

Les conclusions de la sous-section 4.3.1, s'appliquent également pour les figures 7.6 et 7.7 : Pour la majorité des composantes, la moyenne arithmétique varie faiblement dès que l'agrégat atteint 400 grains mais la fluctuation à 500 grains est parfois encore notable (figures 7.6b, 7.6d, 7.6e, 7.7a), faisant qu'un agrégat à 600 grains semble le meilleur compromis entre coût de calcul et faible dépendance à la distribution d'OC.

F Création et insertion d'une seconde phase minoritaire

L'objectif de cette annexe est de présenter succinctement la méthode employée pour faire apparaître au sein d'une microstructure existante (dont la création fut détaillée chapitre 4, section 4.1) une seconde phase, minoritaire par rapport à la première, dont le volume et les proportions sont faibles par rapport aux grains. Dans tout ce qui suit, cette seconde phase est appelée 'carbures' par commodité, en références aux résultats de la section 5.6 du chapitre 5, mais cette génération étant purement géométrique, il est bien sûr possible de lui attribuer d'autres propriétés. Pour rappel, comme cela a été évoqué dans le chapitre 5, ces travaux se basent sur les développements menés par Nathan Turpin dans le cadre d'un stage ingénieur ENSMA.

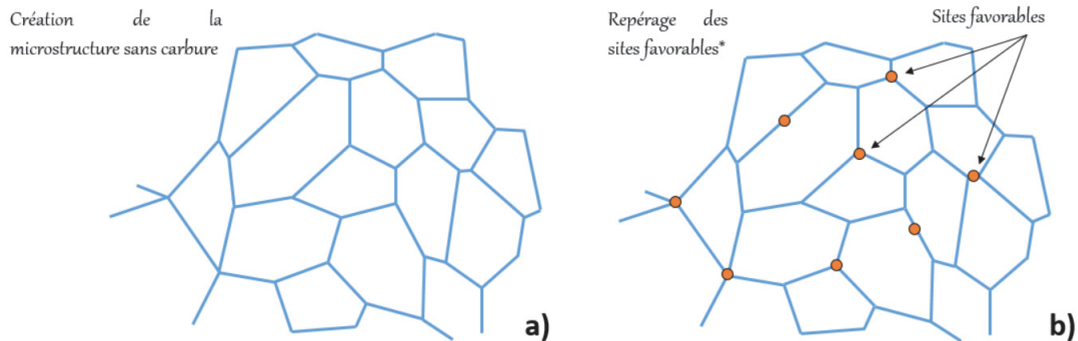
Soit donc une microstructure donnée, obtenue par une tessellation quelconque (Voronoi a été utilisée pour les microstructures concernées mais la méthode s'accommode de n'importe quel type de tessellation). Pour chaque joint de grains (doubles, triples, quadruples et plus), une probabilité p est testée et confrontée à une valeur seuil pXg . Cette valeur seuil est d'autant plus élevée que le joint testé relie un grand nombre de grains. Si p est inférieur à cette valeur seuil, alors le site est déclaré *favorable*. L'ensemble des sites favorables issus des joints doubles, triples et quadruples (et plus) est mélangé (tant pour éviter que les carbures soient tous issus de joints quadruples que pour éviter une anisotropie de la distribution spatiale de ces inclusions) puis la liste est rabotée de manière à correspondre au nombre de carbures initialement exigé.

Vient alors la phase de croissance : dans une première fonction appliquée sur les microstructures C01 à C05 (voir section 5.6, chapitre 6), les carbures ont une croissance homothétique. Chaque carbure se voit attribuer un coefficient lui donnant un volume plus ou moins important.

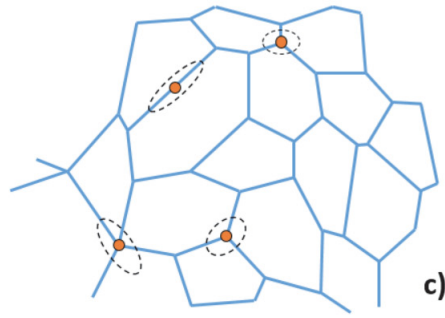
Dans une seconde fonction appliquée sur les microstructures C06 à C10, la forme (*Prolate* ou *Oblate*), l'orientation spatiale et le rapport de forme (compris entre 1 et un maximum arbitraire kC_{max} défini à l'avance) sont déterminés aléatoirement. Un coefficient de volume relatif est également attribué afin de donner des tailles relatives différentes d'un carbure à l'autre. Dans la section 5.6 ce coefficient a été imposé à 1 partout.

L'ensemble des voxels situés alors dans l'enveloppe définie juste avant pour chacun de ces carbures, voit alors son identifiant d'appartenance être modifié pour être associé au carbure concerné.

Les paragraphes précédents peuvent être résumés par la figure suivante :



Création des ellipsoïdes
correspondant à la taille /
forme finale du carbure



Réassignation des
voxels situés dans
l'enveloppe du carbure

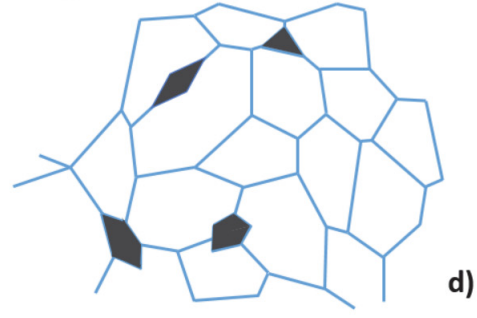


FIGURE 7.8 – Schéma de principe de l'insertion de carbures dans une microstructure constituée. Microstructure* avant insertion des carbures (a). Microstructure après sélection de tous les sites favorables non-intragranulaires** (b). Schéma de principe de l'insertion de carbures dans une microstructure constituée. Microstructure après germination des carbures parmi les sites favorables disponibles et la définition de leur enveloppe géométrique caractéristique (c). Microstructure après réassignation des voxels appartenant aux domaines des carbures (d)

* : le domaine dans lequel est générée la microstructure est constitué de voxels régulièrement agencés. Chaque voxel appartient à un grain, lesquels sont des assemblages de voxels entiers.

** : par construction, les sites favorables à l'émergence d'une phase minoritaire sont systématiquement situés dans l'espace entre les grains pour préserver autant que faire se peut la convexité de ces derniers. En effet, si la présence d'un carbure aux côtés d'un grain n'entame que localement sa convexité, le cas de figure est tout autre si le carbure est situé en plein coeur d'un grain. Dans ce cas-ci, il est impossible de faire une approximation sphéroïdale et donc d'appliquer la théorie d'Eshelby. Les germinations intra-granulaires ont donc été interdites ici.

Ce schéma de principe peut être complété par les algorithmes suivants :

```

1 Algorithme : Segmentation08C
   Input : taille domaine, Nombre de grains (NbG), Nombre de voxels par côté,
           type de segmentation, Nombre de Carbures (NbC), p4g, p3g, p2g*, taille
           volumique relative des carbures ( $TR$ )
   Output : Avant et Après insertion des carbures dans la microstructure : tableau
           des centroïdes, tableau des ' $\alpha$ -shape', tableau des sommets par cellule
2 Génération de la microstructure sans carbure identique à l'algorithme
   4.1
3 génération des centroïdes / germes  $p_i$  disposés aléatoirement dans le domaine
   (Processus de Point de Poisson)
4 option : création d'un rayon équivalent associé **
5 division du domaine en voxels
6 for chaque voxel  $Vox_j$  do
7   |  $d_{j, min}$  =taille domaine
8 end for
9 for chaque germe  $p_i$  do
10  | for chaque voxel  $Vox_j$  do
11    | if type segmentation = Voronoi then
12      |  $d_j = d_V$ 
13    | else if type segmentation = Laguerre then
14      |  $d_j = d_L$ 
15    | else if type segmentation = Johnson-Mehl (isotrope) then
16      |  $d_j = d_{J-M}$ 
17    | else if type segmentation = Johnson-Mehl (anisotrope) then
18      |  $d_j = d_{J-M-A}$ 
19    | if  $d_j < d_{j, min}$  then
20      |  $Vox_j \in \mathcal{C}_i$ 
21      |  $d_{j, min} = d_j$ 
22    | end if
23  | end for
24  remplissage du tableau des sommets par cellule par identification des voxels
25  conversion de la cellule en objet ' $\alpha$ -shape'
26 end for
27 Création carbures initialisation des listes 4g, 3g et 2g contenant respectivement
   les centroïdes de carbures situés à la frontière entre 4 grains et plus, trois grains
   et deux grains
28 for chaque voxel  $Vox_j$ *** do
29  |  $p = rand()$  (probabilité d'apparition du carbure pour le voxel)
30  | calcul du nombre de voisins différents ( $nX$ ) autour du voxel
31  | confrontation à la valeur seuil pour  $nX$  voisins différents
32  | si  $p < pXg$  alors ajout d'une ligne à la liste  $Xg$  et sauvegarde des coordonnées
   du voxel
33 end for
34 suite de l'algorithme page suivante ...
35 * :  $pXg$  correspond à la probabilité d'apparition d'un carbure à la frontière entre
   X grains différents. Cette probabilité est d'autant plus élevée que le nombre de
   grains différents est élevé
36 ** : uniquement dans les tessellations de Laguerre et Johnson-Mehl isotrope
37 *** : à l'exception des voxels frontaliers

```

Algorithme 7.1 : Algorithme de génération de carbures sphériques

```

1 Algorithme : Segmentation08C
   Input : taille domaine, Nombre de grains (NbG), Nombre de voxels par côté,
           type de segmentation, Nombre de Carbures (NbC), p4g, p3g, p2g*, taille
           volumique relative des carbures ( $TR$ )
   Output : Avant et Après insertion des carbures dans la microstructure : tableau
           des centroïdes, tableau des ' $\alpha$ -shape', tableau des sommets par cellule

2 ... suite de l'algorithme de la page précédente
3 mélange des listes 4g, 3g et 2g (afin d'éviter toute ségrégation spatiale)
4 concaténation des listes non vides en une liste SeedsC1
5 Ajustement de la taille de SeedsC1 au nombre de carbures demandés**
6 Identification des voxels correspondant aux centroïdes de carbures
7  $RmoyG = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot Vol_{moy}}{4\pi}}$ 
8  $RmoyC = \sqrt[3]{TR} \cdot RmoyG$ 
9 Croissance carbures
10 for chaque carbure do
11   for chaque voxel  $Vox_j$ *** do
12     calcul de la distance  $d$  entre le voxel et le centroïde de carbure
13     if  $d < RmoyC$  then
14       le voxel est identifié au carbure concerné
15     end if
16   end for
17 end for
18 remplissage du tableau des sommets par cellule par identification des voxels
19 (les carbures sont considérés comme des grains supplémentaires)
20 conversion de la cellule en objet ' $\alpha$ -shape'
21 (à noter que les grains initiaux ne sont plus forcément tout à fait convexes)
22 * : pXg correspond à la probabilité d'apparition d'un carbure à la frontière entre
    X grains différents. Cette probabilité est d'autant plus élevée que le nombre de
    grains différents est élevé
23 ** : le nombre de sites favorables est normalement très supérieur au nombre de
    carbures demandés
24 *** : à l'exception des voxels frontaliers

```

Algorithme 7.2 : Algorithme de génération de carbures sphériques

```

1 Algorithme : Segmentation09C
Input : taille domaine, Nombre de grains (NbG), Nombre de voxels par côté,
        type de segmentation, Nombre de Carbures (NbC), p4g, p3g, p2g*, taille
        volumique relative des carbures ( $TR$ ), rapport de forme (carbure)
        maximal ( $kC_{max}$ )
Output : Avant et Après insertion des carbures dans la microstructure : tableau
        des centroïdes, tableau des ' $\alpha$ -shape', tableau des sommets par cellule ;
        tableau des formes des carbures, tableau des rapports de forme des
        carbures ; tableau des orientations spatiales des carbures

2 Jusque à l'accroissement des carbures, l'algorithme ci-dessous est
similaire à l'algorithme 7.1/7.2

3 génération des centroïdes / germes  $p_i$  disposés aléatoirement dans le domaine
  (Processus de Point de Poisson)
4 option : création d'un rayon équivalent associé **
5 division du domaine en voxels
6 for chaque voxel  $Vox_j$  do
7   |  $d_{j, min}$  =taille domaine
8 end for
9 for chaque germe  $p_i$  do
10  | for chaque voxel  $Vox_j$  do
11    | if type segmentation = Voronoi then
12      |  $d_j = d_V$ 
13    else if type segmentation = Laguerre then
14      |  $d_j = d_L$ 
15    else if type segmentation = Johnson-Mehl (isotrope) then
16      |  $d_j = d_{J-M}$ 
17    else if type segmentation = Johnson-Mehl (anisotrope) then
18      |  $d_j = d_{J-M-A}$ 
19      | if  $d_j < d_{j, min}$  then
20        |  $Vox_j \in \mathcal{C}_i$ 
21        |  $d_{j, min} = d_j$ 
22      | end if
23    end for
24    remplissage du tableau des sommets par cellule par identification des voxels
25    conversion de la cellule en objet ' $\alpha$ -shape'
26 end for

27 suite de l'algorithme page suivante ...

28 * : pXg correspond à la probabilité d'apparition d'un carbure à la frontière entre
    X grains différents. Cette probabilité est d'autant plus élevée que le nombre de
    grains différents est élevé

29 ** : uniquement dans les tessellations de Laguerre et Johnson-Mehl isotrope

```

Algorithme 7.3 : Algorithme de génération de carbures sphéroïdaux


```

1 Algorithme : Segmentation09C
Input : taille domaine, Nombre de grains (NbG), Nombre de voxels par côté,
        type de segmentation, Nombre de Carbures (NbC), p4g, p3g, p2g*, taille
        volumique relative des carbures ( $TR$ ), rapport de forme (carbure)
        maximal
Output : Avant et Après insertion des carbures dans la microstructure : tableau
        des centroïdes, tableau des ' $\alpha$ -shape', tableau des sommets par cellule ;
        tableau des formes des carbures, tableau des rapports de forme des
        carbures ; tableau des orientations spatiales des carbures

2 ... suite de l'algorithme de la page précédente
3 Création carbures
4 initialisation des listes 4g, 3g et 2g contenant respectivement les centroïdes de
  carbures situés à la frontière entre 4 grains et plus, trois grains et deux grains
5 for chaque voxel  $Vox_j$ *** do
6    $p = rand()$  (probabilité d'apparition du carbure pour le voxel)
7   calcul du nombre de voisins différents ( $nX$ ) autour du voxel
8   confrontation à la valeur seuil pour  $nX$  voisins différents
9   si  $p < pXg$  alors ajout d'une ligne à la liste  $Xg$  et sauvegarde des coordonnées
   du voxel
10 end for
11 mélange des listes 4g, 3g et 2g (afin d'éviter toute ségrégation spatiale)
12 concaténation des listes non vides en une liste SeedsC1
13 Ajustement de la taille de SeedsC1 au nombre de carbures demandés**
14 Identification des voxels correspondant aux centroïdes de carbures
15  $RmoyG = \sqrt[3]{\frac{3 \cdot Vol_{moy}}{4\pi}}$ 
16  $RmoyC = \sqrt[3]{TR} \cdot RmoyG$ 
17 Croissance carbures
18 for chaque carbure  $iC$  do
19   assignation d'une forme aléatoire (Prolate, Oblate ou Sphère)
20   assignation d'un rapport de forme aléatoire compris entre 1 et  $kCmax$ 
21   attribution d'une orientation spatiale arbitraire
22 end for
23 suite de l'algorithme page suivante ...
24 * :  $pXg$  correspond à la probabilité d'apparition d'un carbure à la frontière entre
  X grains différents. Cette probabilité est d'autant plus élevée que le nombre de
  grains différents est élevé
25 ** : le nombre de sites favorables est normalement très supérieur au nombre de
  carbures demandés
26 *** : à l'exception des voxels frontaliers

```

Algorithme 7.4 : Algorithme de génération de carbures sphéroïdaux

```

1 Algorithme : Segmentation09C
Input : taille domaine, Nombre de grains (NbG), Nombre de voxels par côté,
        type de segmentation, Nombre de Carbures (NbC), p4g, p3g, p2g*, taille
        volumique relative des carbures ( $TR$ ), rapport de forme (carbure)
        maximal
Output : Avant et Après insertion des carbures dans la microstructure : tableau
        des centroïdes, tableau des ' $\alpha$ -shape', tableau des sommets par cellule ;
        tableau des formes des carbures, tableau des rapports de forme des
        carbures ; tableau des orientations spatiales des carbures

2 ... suite de l'algorithme de la page précédente
3 for chaque carbure  $iC$  do
4   obtention des coordonnées du carbure à "faire croître"
5   calcul de la matrice de passage  $P_c$  liée à l'orientation spatiale du carbure
6   for chaque voxel  $Vox_j$ *** do
7     calcul de la distance  $d$  entre le voxel et le centroïde de carbure
8     calcul du vecteur entre le voxel et le centroïde du carbure
9     if le carbure est un Prolate then
10       $axe = [kC(iC) \ 0 \ 0]$ 
11       $axeLocal = P_c.axe$  (axe principal orienté du sphéroïde représentant le
        carbure)
12       $\gamma_{appC}$  est l'angle entre cet axe principal orienté et le vecteur entre le
        voxel et le centroïde
13       $d_{crit} = RmoyC.(kC(iC).cos(\gamma_{appC}) + sin(\gamma_{appC}))$ 
14    else if le carbure est un Oblate then
15       $axe = [0 \ 0 \ 1]$ 
16       $axeLocal = P_c.axe$  (axe principal orienté du sphéroïde représentant le
        carbure)
17       $\alpha_{appC}$  est l'angle entre cet axe principal orienté et le vecteur entre le
        voxel et le centroïde
18       $d_{crit} = RmoyC.(cos(\alpha_{appC}) + kC(iC).sin(\alpha_{appC}))$ 
19    else if le carbure est une Sphère then
20       $d_{crit} = RmoyC.kC(iC)$ 
21    if  $d < d_{crit}$  then
22      le voxel est identifié au carbure concerné
23    end if
24  end for
25 end for
26 remplissage du tableau des sommets par cellule par identification des voxels
27 (les carbures sont considérés comme des grains supplémentaires)
28 conversion de la cellule en objet ' $\alpha$ -shape'
29 (à noter que les grains initiaux ne sont plus forcément tout à fait convexes)
30 * : pXg correspond à la probabilité d'apparition d'un carbure à la frontière entre
    X grains différents. Cette probabilité est d'autant plus élevée que le nombre de
    grains différents est élevé
31 *** : à l'exception des voxels frontaliers

```

Algorithme 7.5 : Algorithme de génération de carbures sphéroïdaux

G Premier développement sur la prise en compte d'une grille de mesure

Dans la présente thèse, le champ local n'a pu être calculé qu'au centroïde des grains ce qui constitue un véritable handicap par rapport aux méthodes en champs complets où le champ local est accessible en tous points. Le module EIM pouvant calculer l'influence de chaque voisin n'importe où dans l'espace, la perspective de construire une grille de mesure indépendante de l'agrégat permettrait d'accéder véritablement à l'ensemble du champ local et rehausserait l'intérêt du GNOME vis-à-vis des méthodes en champs complets.

L'objectif de cette annexe est de présenter les premiers développements réalisés sur le sujet. L'outil GNOME a donc été adapté pour qu'il accepte une grille de mesure, laquelle a été pensée pour être totalement quelconque (régulière/irrégulière, de densité arbitraire de points de mesure...). Néanmoins, en première approche - et en utilisant le fait que l'agrégat est pour l'instant généré dans un domaine cubique - une grille de mesure régulière a été conçue (un nombre de points par côté du domaine cubique est fixé et ceux-ci sont répétés dans tout le domaine, de la même manière que les voxels, voir section 4.1, chapitre 4). Une interpolation linéaire (polynômes d'interpolation de Lagrange) a été ajoutée pour pouvoir mesurer le champ local en un point précis, potentiellement non situé sur un des points de mesure de la grille régulière.

Note : le domaine dans lequel est définie la grille de mesure doit être inscrit (pas forcément égal, il peut être plus limité et localisé) dans le domaine de génération de l'agrégat.

Une première exploitation de cette grille de mesure a été réalisée sur l'agrégat de 686 grains de la sous-section 4.3.1 du chapitre 4 afin de considérer le maximum de grains avec les propriétés matériaux du 316L et chargé successivement en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) et en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$). La densité de la grille de mesure a été choisie de telle sorte que les points de mesure correspondent aux centroïdes des voxels (on rappelle que l'agrégat est divisé en voxels et que les grains sont constitués d'un nombre fini de voxels). L'ensemble des voxels d'un grain donné Bi (de germe p_i) ont leurs centroïdes plus proche de p_i que de n'importe quel autre germe (voir équation 4.1, sous-section 4.1.1, chapitre 4).

La règle de transition pour l'AC, (équation 3.26, sous-section 3.6.2, chapitre 3) est ici appliquée en tout point de chaque grain et pas seulement au centroïde, ce qui a pour conséquence d'augmenter sensiblement le temps de calcul, même si celui-ci reste inférieur au temps exigé par une simulation en champs complets. La figure 7.9 (respectivement 7.10) représente les résultats du GNOME relevés aux centroïdes des grains et la valeur des moyennes volumiques correspondantes dans chaque grain, le tout en déformation uniaxiale (resp. en glissement simple) pour un rayon cadastral $\mathcal{R}_c = 2.5$ dans les deux cas.

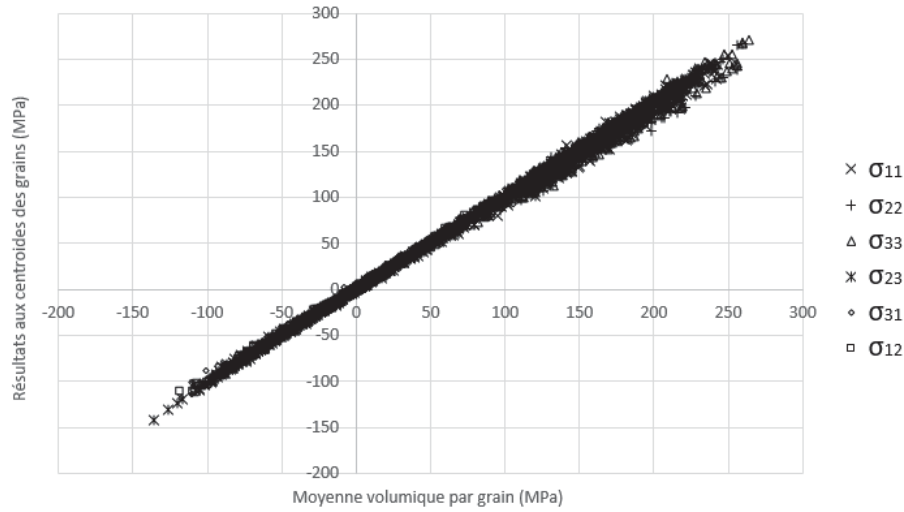


FIGURE 7.9 – Corrélation entre les résultats du GNOME relevés aux centroïdes et les moyennes volumiques par grain pour une déformation uniaxiale selon l’axe X_3 telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (agrégat de 686 grains)

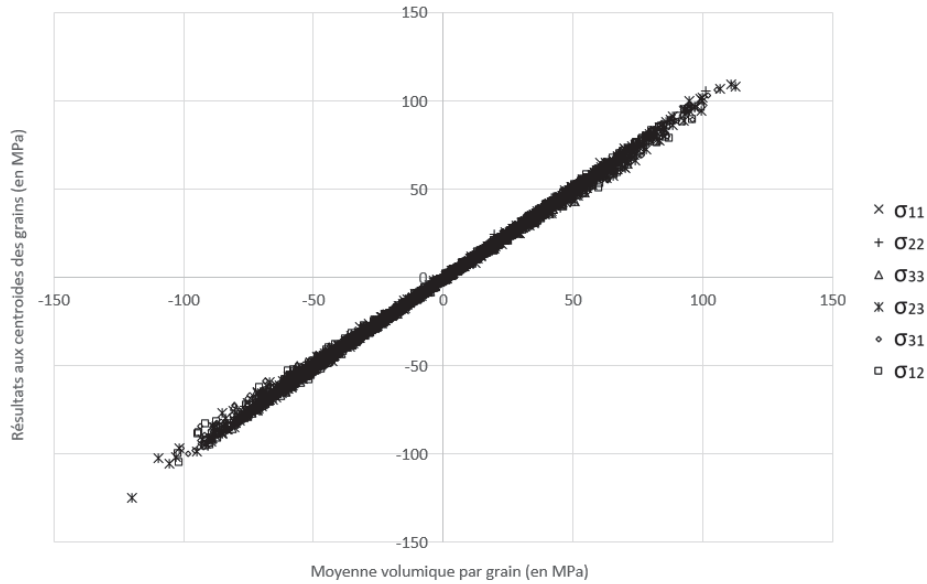


FIGURE 7.10 – Corrélation entre les résultats du GNOME relevés aux centroïdes et les moyennes volumiques par grain pour un glissement simple dans le plan $(X_1; X_2)$ tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ (agrégat de 686 grains)

Les figures 7.9 et 7.10 montrent d’une part que, d’un point de vue opérationnel, l’outil GNOME fonctionne avec une grille de mesure régulière malgré un coût de calcul bien plus élevé. En effet, pour un agrégat de 686 grains, la densité choisie pour la grille de mesure implique environ 2.3 millions de points de mesure. Le temps de calcul (hors génération de la microstructure) est d’environ 2-3 heures, à comparer aux 2-3 minutes que prend le même calcul effectué aux seuls centroïdes. Néanmoins, l’outil GNOME donne cette fois accès à tout le champ local tout en restant moins coûteux que les méthodes en champs complets (une simulation EF sur le même agrégat avec une taille de maillage comparable étant hors de portée d’un ordinateur standard).

D'autre part, le résultat de ces calculs montre que la moyenne volumique est très proche de la valeur au centroïde pour chacun des grains de l'agrégat, pour l'un et l'autre des chargements appliqués, ce qui suggère une sous-estimation de l'hétérogénéité intra-granulaire dont il faudra approfondir les causes et qui pourra être très probablement moins prononcée en améliorant l'approximation ellipsoïdale (puisque'elle ne serait plus sphéroïdale) de chacun des grains. Enfin, la définition d'une grille de mesure permettrait de revenir à la définition de l'effet de voisinage originale proposée par Bretin impliquant les déformations moyennes.

Liste des Notations

Note : Les notations et abréviations sont écrites et classées par ordre alphabétique, avec leur version francophone lorsque celle-ci existe, ou la version anglophone suivie d’une traduction sinon. Les lettres grecques sont classées au sein de cet alphabet par leur appellation, ceci avant les minuscules, majuscules et typographies spéciales.

- $\hat{(\cdot)}$: tenseur exprimé avec la notation de Mandel
- $\hat{(\cdot)}$: désignation des variables et fonctions translatées dans l’espace de Fourier
- $\tilde{(\cdot)}$: tenseur exprimé dans le repère morphologique
- $\overline{(\cdot)}$: notation désignant la valeur moyenne
- $(\cdot)^*$: tenseur diagonalisé
- $(\cdot)_{,app}$: valeur apparente
- $(\cdot)_{,carb}$: désigne une valeur attachée aux carbures lorsque ceux-ci sont présents dans l’agrégat
- $(\cdot)_{,grain}$: désigne une valeur attachée aux grains lorsque des carbures sont également présents dans l’agrégat
- $(\cdot)_i$: composante i d’un tenseur d’ordre 1
- $(\cdot)_{ij}$: composante ij d’un tenseur d’ordre 2
- $(\cdot)_{ijkl}$: composante $ijkl$ d’un tenseur d’ordre 4
- $(\cdot)_{ijklmnop}$: composante $ijklmnop$ d’un tenseur d’ordre 8
- $(\cdot)_{,j}$: $= \partial/\partial z_j$ dérivée partielle par rapport à la composante j d’une variable z
- $(\cdot)_{,jk}$: $= \partial^2/\partial z_j \partial z_k$ dérivée partielle seconde par rapport aux composantes j et k d’une variable z
- $(\cdot)_{,max}$: valeur maximale
- $(\cdot)_{,med}$: valeur médiane
- $(\cdot)_{,min}$: valeur minimale
- $(\cdot)_{,moy}$: valeur moyenne
- $(\cdot)_r$: valeur dans la phase r
- $(\cdot)(x)$: valeur au point d’intérêt
- $(\cdot)^T$: transposée

- α : angle de rotation quelconque (angle en degrés sauf indication contraire)
- a : demi-petit axe dans le cas sphérique
- a_i ($i \in \{1, 2, 3\}$) : longueurs des demi-axes de l'ellipsoïde dans le repère morphologique associé
- A : grain A , désigne généralement le grain d'intérêt, où est effectué le relevé du champ local.
- Notation également utilisée pour désigner un tenseur d'ordre 2 quelconque
- \tilde{A} : moment d'inertie de $I_{z,p}^*$
- AC : Automate Cellulaire
- ACoh : Auto-Cohérent(e) (méthode)
- A_i, A_{ij} : intégrales elliptiques liées à la déformation interne de l'inclusion
- \mathbb{A} : tenseur de localisation des déformations.
- Notation également utilisée pour désigner un tenseur d'ordre 4 quelconque

- B. : Burgers (relations de)
- \tilde{B} : autre moment d'inertie de $I_{z,p}^*$
- Bi : grain voisin quelconque du grain d'intérêt A
- $\{Bi\}$: ensemble du voisinage du grain d'intérêt A
- B_I, B_{IJ} : intégrales elliptiques liées à la déformation du milieu infini
- BRE : Balayage Radial de l'Enveloppe

- c_α : notation abrégée pour $\cos(\alpha)$
- c_i ($i \in \{1, 2, 3\}$) : axes du repère cristallographique / de la maille cristalline
- \tilde{C} : troisième moment d'inertie de $I_{z,p}^*$
- CC : Cubique Centré (structure cristallographique) / BC (Body Centered) en anglais
- CFC : Cubique Face Centré (structure cristallographique) / FCC (Face Cubic Centered) en anglais
- C_X : désignation de microstructures à 600 grains s'étant vu adjoindre une seconde population de carbures ($X \in [[1, .. 10]]$) (voir section 5.6, chapitre 5)
- C_{X-gY} : grain n°Y ($Y \in [[1, .. 600]]$) appartenant à la microstructure C_X ($X \in [[1, .. 10]]$) (voir section 5.6, chapitre 5)
- C_{X-Z} : carbure n°Z ($Z \in [[1, .. 12]]$) appartenant à la microstructure C_X ($X \in [[1, .. 10]]$) (voir section 5.6, chapitre 5)
- \mathbb{C} : tenseur de rigidité local (au point x)
- \mathbb{C}^0 : tenseur de rigidité du milieu infini / du milieu global
- \mathbb{C}^{Bi} : tenseur de rigidité du grain voisin Bi
- \mathbb{C}_c : tenseur de rigidité d'une inclusion anisotrope écrit dans le repère de la maille cristalline
- \mathbb{C}^{HS} : estimation du tenseur de rigidité effective par l'approximation de Hashin & Shtrickman
- \mathbb{C}_I : tenseur de rigidité de l'inclusion (isotrope ou anisotrope) écrit dans son repère local

- \mathbb{C}_{Ig} : tenseur de rigidité de l'inclusion (isotrope ou anisotrope) écrit dans le repère global du domaine
 $\mathcal{C}(i)$: cellule obtenue par tessellation (Voronoi, Laguerre ou Johnson-Mehl) et contenant l'ensemble des points les plus proches du germe p_i
 δ_{ij} : symbole de Kronecker
 $\Delta(.)$: différentiel de valeurs, généralement entre le minimum et la maximum
 $\Delta\varepsilon$: différentiel de déformation
 $\Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^A$: différentiel de déformation du à l'influence du voisinage $\{Bi\}$ sur le grain A
 $\Delta\varepsilon_{Bi}^{Aeff}$: différentiel de déformation du à l'influence du voisin Bi à l'emplacement du grain A pourvu des propriétés du milieu effectif
 $\Delta\varepsilon_{\{Bi\}}^{Aeff}$: différentiel de déformation du à l'influence du voisinage $\{Bi\}$ à l'emplacement du grain A pourvu des propriétés du milieu effectif
 $d(.)$: fonction distance relative
 $d\varepsilon_{ij}$: champ local de déformation ôté de sa composante moyenne, appelé aussi fluctuation locale
 $d\mathbb{C}$: différentiel de tenseur de rigidité, appelé aussi différentiel de rigidité
 d_{JM} : fonction distance utilisant la définition de Johnson-Mehl (isotrope)
 d_{JMA} : fonction distance utilisant la définition de Johnson-Mehl Anisotrope
 d_L : fonction distance utilisant la définition de Laguerre
 d_V : fonction distance utilisant la définition de Voronoi
 \mathbb{D} : tenseur de Mura (d'ordre 4)
 \mathcal{D} : domaine (inclu dans \mathbb{R}^d , $d \in \mathbb{N}$) où sont générés les germes p_i
 ε : tenseur de déformation local
 ε^* : déformation fictive équivalente
 ε^0 : déformation globale (et homogène) imposée au milieu infini
 ε_{eff}^A : déformation du grain A noyé dans le milieu effectif
 $\varepsilon_{\{Bi\}}^A$: déformation du grain A entouré du voisinage $\{Bi\}$
 ε_I : déformation dans l'inclusion
 η : tenseur symétrique d'ordre 2 ayant la dimension d'une déformation
 $e_{i, JM}$: ellipsoïde caractérisant la forme initiale du germe p_i dans les distributions de Johnson-Mehl Anisotrope
 $e_{x, i, JMA}$: projection dans la direction x de l'enveloppe des vitesses de croissance de la cellule liée au germe p_i dans les distributions de Johnson-Mehl Anisotrope
 E_0 : module d'Young du milieu infini / global
 E_{carb} : module d'Young d'un carbure générique
 E_{mat}^{eff} : module d'Young effectif d'un agrégat de matériau 'mat' homogénéisé et isotrope
 EF : Elements Finis
 E_I : module d'Young de l'inclusion isotrope
 EIM : Equivalent Inclusion Method (Méthode de l'Inclusion Equivalente)

ETS	: Ecole de Technologie Supérieure (Montréal, Canada)
E_{X_i}	: module d'Young de la maille cristalline projeté dans la direction X_i (mailles CFC uniquement, voir équation 3.24, sous-section 3.5.1, chapitre 3)
FFT	: Fast Fourier Transform (Transformées de Fourier Rapides)
Γ^0	: opérateur périodique de Green associé au tenseur \mathbb{C}^0
GNOME	: acronyme de G é N ération de p O lycristaux avec M orphologie et E ffets de voisinage
H	: rapport de rigidité défini par [Vincent et <i>al.</i> , 2014]
I	: domaine de l'espace occupé par une inhomogénéité ellipsoïdale
Id_y	: indicatif du grain dans lequel se trouve le point y
$I_{z, e}$: matrice d'inertie d'un ellipsoïde quelconque, exprimée dans le repère global
$I_{z, p}$: matrice d'inertie d'un polyèdre quelconque, exprimée dans le repère global
\mathbb{I}	: identité tensorielle classique d'ordre 4
$\mathbb{I}d$: tenseur identité d'ordre quelconque
k	: rapport de forme
kC	: rapport de forme d'un carbure à croissance sphéroïdale
KS	: Kurdjumow-Sachs (relations de)
λ	: fonction scalaire reliant le point d'intérêt aux intégrales elliptiques (voir équation 3.13, sous-section 3.1.2, chapitre 3)
l_1	: cosinus directeur entre l'axe cristallographique c_3 et l'axe X_i du module d'Young projeté
LOPFA	: Laboratoire d'Optimisation des Procédés de Fabrication Avancés
μ_0	: module de cisaillement du milieu infini
μ_I	: module de cisaillement de l'inclusion
m	: rapport de rigidité défini par [Shibata & Ono, 1978]. Notation désignant également la masse utilisée dans la formule de la matrice d'inertie
m_1	: cosinus directeur entre l'axe cristallographique c_1 et l'axe X_i du module d'Young projeté
MEF	: Méthode des Elements Finis
\mathcal{M}_I	: moment d'inertie

ν_0 : coefficient de Poisson du milieu infini
 ν_{carb} : coefficient de Poisson d'un carbure générique
 ν_{mat}^{eff} : coefficient de Poisson effectif d'un agrégat de matériau '*mat*' homogénéisé et isotrope
 ν_I : coefficient de Poisson de l'inclusion isotrope
 n_1 : cosinus directeur entre l'axe cristallographique c_2 et l'axe X_i du module d'Young projeté
 Nds : nombre de points contenus dans une cellule
NTFA : Non-uniform Transformation Field Analysis (Analyse des Transformations de Champs Non-uniformes)

Ω : domaine d'étude, de dimension quelconque
OC : Orientation(s) Cristallographique(s)

φ : troisième angle d'Euler / angle de *rotation propre*
 φ_C : troisième angle d'Euler pour la rotation cristalline
 ψ : premier angle d'Euler / angle de *précession*
 ψ_C : premier angle d'Euler pour la rotation cristalline
 p : poids relatif
 p_i : germe n°i ($i \in [[1, \dots, n]]$) parmi les n générés pour la création de l'agrégat
 ptM_i : point de mesure n°i
 pXg : probabilité d'apparition d'un carbure dans un joint de grain reliant X grains

PGD : Proper Generalized Decomposition (Décomposition Généralisée aux valeurs Propres)
POD : Proper Orthogonal Decomposition (Décomposition Orthogonale aux valeurs Propres)
 \mathbb{P} : tenseur de Hill
 \mathbb{P}^{JM} : ensemble des germes d'une tessellation de Johnson-Mehl (isotrope)
 \mathbb{P}^{JMA} : ensemble des germes d'une tessellation de Johnson-Mehl Anisotrope
 $\mathbb{P}^{Laguerre}$: ensemble des germes d'une tessellation de Laguerre
 $\mathbb{P}^{Voronoi}$: ensemble des germes d'une tessellation de Voronoi

r : translation dans le plan 2D
 $r_i^{Laguerre}$: poids relatif de Laguerre attribué au germe p_i
 R : matrice de passage / de rotation du repère *global* vers le repère *morphologique* (voir équation 3.20, sous-section 3.2.1, chapitre 3)
 R^C : matrice de passage / de rotation du repère de la *maille cristalline* vers le repère *global*
 \mathbb{R}^d : ensemble des réels en dimension d , $d \in \mathbb{N}$
 \mathcal{R}_c : rayon cadastral

σ	: tenseur de contrainte local
σ_0	: limite d'élasticité
σ^0	: chargement en contrainte imposée à l'infini
s_α	: notation abrégée pour $\sin(\alpha)$
\mathbb{S}	: tenseur de souplesse local, inverse du tenseur de rigidité local \mathbb{C}
$\mathbb{S}_{\mathbb{E}}$: tenseur d'Eshelby
τ	: champ de polarisation (voir équation 2.1, sous-section 2.2.1.2, chapitre 2)
θ	: deuxième angle d'Euler / angle de <i>nutaton</i>
θ_C	: deuxième angle d'Euler pour la rotation cristalline
TFA	: Transformation Field Analysis (Analyse de Transformée de Champs)
u	: champ de déplacement (au point x)
Vox_j	: voxel n° j
ξ	: point dans l'espace de Fourier
x_i ($i \in \{1, 2, 3\}$)	: axes du repère morphologique (<i>i.e.</i> de l'ellipsoïde)
X_i ($i \in \{1, 2, 3\}$)	: axes du repère global
X'_i ($i \in \{1, 2, 3\}$)	: axes du repère temporaire généré par la <i>precession</i> (voir équation 7.27, annexe B)
X''_i ($i \in \{1, 2, 3\}$)	: axes du repère temporaire généré par la <i>precession</i> et la <i>nutaton</i> (voir équation 7.28, annexe B)

Table des figures

1.1	Vol Aloha Airlines 243 (Hilo - Honolulu) après "l'incident"	12
2.1	Représentation schématique d'un polycristal soumis à un chargement quelconque, et de sa discrétisation en cristaux définis en propre par EF (figure extraite de [Dawson & Boyce, 2018]). A noter que le schéma montre quelques éléments par cristal seulement, mais ce nombre est généralement bien plus élevé	19
2.2	Trois exemples du jeu de la vie, imaginé par Conway en 1970* avec respectivement une structure stable (a), oscillante (b) et un vaisseau spatial (c)	27
2.3	Cellule tétrakaidécaédrale avec numérotation des voisins (a) ** - Structure de Kelvin à 686 grains [Bretin, 2020] (b)	28
2.4	Structure de Kelvin à 686 grains [Bretin, 2020] (a) - Du fait de la structure par nature répétitive de l'agrégat de Kelvin, si la cellule étudiée est la cellule <i>rouge</i> , alors les cellules <i>verte</i> et <i>bleue</i> sont des voisines directes avec des vecteurs intercentroïdes respectivement de (1 -1 1) et (1 -1 -1) (b) - figure extraite de [Bretin et al., 2019b]	31
2.5	Organisation des couches de voisins autour du grain étudié avec respectivement 14 grains (première couche, en violet); 50 grains (deuxième couche, en jaune) et 194 grains (troisième couche, en bleu) [Bretin, 2020]	31
2.6	Calcul de l'effet de voisinage d'un grain <i>A</i> au sein d'un agrégat de Kelvin selon le modèle de Bretin avec un focus sur 3 voisins parmi les 14 voisins directs	32
2.7	Figures 4.6a et figure 4.6c (pp.102-103) de [Bretin, 2020] illustrant la proximité des résultats obtenus par EF et par le modèle de Bretin. A gauche, comparaison effectuée pour différents tirages de distributions aléatoires d'OC pour un agrégat de 686 grains sous déformation uniaxiale tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (a). A droite, histogramme combiné et gaussiennes associées des écarts EF / modèle de Bretin pour les grains avec différents voisinages à iso-OC, iso-agrégat et iso-chargement (b)	33
3.1	Inclusion ellipsoïdale et système d'axes local [Mura, 1987]	40
3.2	<i>Prolate</i> - Composante σ_{33} du tenseur des contraintes dans la matrice au point A (figure 3.1), fonction de $\frac{1}{k}$ pour différents contrastes de rigidité (<i>H</i>) - Comparaison entre les résultats du code EIM de la thèse (marqueurs carrés) et les résultats de Mura (lignes, importées à partir de la figure 5 de [Vincent et al., 2014])	44

3.3	<i>Oblate</i> - Composante σ_{33} du tenseur des contraintes dans la matrice au point A (figure 3.1), normalisée par la contrainte à l'infini σ_{22}^0 en fonction de $\frac{1}{k}$ pour différents contrastes de rigidité (m) - Comparaison entre les résultats du code EIM de la thèse (marqueurs carrés) et les résultats analytiques de Shibata & Ono (lignes, interpolées à partir de la figure 10 de [Shibata & Ono, 1978])	45
3.4	<i>Oblate</i> - Contrainte σ_{33} dans l'inclusion normalisée par la contrainte à l'infini σ_{22}^0 en fonction de $\frac{1}{k}$ pour différents contrastes de rigidité (m) - Comparaison entre les résultats du code EIM développé dans la thèse (marqueurs carrés) et les résultats analytiques de Shibata & Ono (lignes, interpolées à partir de la figure 2 de [Shibata & Ono, 1978])	46
3.5	Représentation schématisée des sphéroïdes <i>Oblate</i> et <i>Prolate</i> et de leurs systèmes d'axes associés. Le repère global (en rouge) rattaché au milieu infini est fixé. Le repère morphologique en noir est rattaché au sphéroïde. Les deux repères coïncident avant l'orientation spatiale du sphéroïde	48
3.6	Schéma de l'application des chargements et des conditions aux limites pour les simulations EF : Traction Uniaxiale (a) ; Extension Uniaxiale (b) ; Glissement simple (c)	49
3.7	Vue partielle du cube externe (a) et du cube interne au centre, de maillage bien plus fin. Zoom sur le cube interne cloisonné (b) avec mise en évidence de toute une zone de maillage fin dans le proche voisinage de l'interface et des chemins de mesure	50
3.8	Vue du cloisonnement du cube interne d'une structure <i>Dupuy de Lôme Dévié</i> avec en pointillés jaune les plans de coupe et les axes morphologiques du sphéroïde	51
3.9	Cavité <i>Oblate</i> , $k = 5$ - Evolution des contraintes normales $\sigma_{11} = \sigma_{22}$ (a), σ_{33} (c), dans le milieu infini le long de l'axe x_3 du repère morphologique et cartographie des valeurs atteintes par $\sigma_{22} = \sigma_{11}$ dans le plan ($x_1 ; x_3$) (b). Les Résultats EIM et EF sont comparés dans le cadre d'une traction uniaxiale selon X_3 ($=x_3$ ici), telle que $\sigma_{33}^0 = 1\text{Pa}$	52
3.10	<i>Oblate</i> ($k = 8$) isotrope - évolution de la contrainte équivalente de von Mises le long de l'axe global X_2 depuis l'interface avec l'inclusion pour différentes orientations spatiales ($[\psi = 0^\circ ; \theta = 0^\circ ; \varphi = 0^\circ]$ en bleu ; $[\psi = 0^\circ ; \theta = 67^\circ ; \varphi = 0^\circ]$ en noir ; $[\psi = 42^\circ ; \theta = 16^\circ ; \varphi = 0^\circ]$ en vert). Les résultats EIM et EF sont comparés pour une extension uniaxiale d'axe X_3 et d'amplitude $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$	54
3.11	Illustration de l'application des triplets d'angles d'Euler $[-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$ avec l'axe X_1 surligné en jaune (a) et $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$ avec l'axe X_3 surligné en jaune (b). Les axes cristallographiques sont en violet	56
3.12	Représentation 3D du module d'Young du Fer projeté dans toutes les directions (unité : 10^{12}N/m^2) dans le repère de la maille cristalline. Figure extraite de [Zhang et al., 2007])	56
3.13	<i>Oblate</i> anisotrope (ori. cristalline : $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$) - évolution de la contrainte équivalente de von Mises au centroïde de l'inclusion en fonction de θ ($\psi = \varphi = 0$), pour 4 rapports de forme ($k = 1$ en bleu ; $k = 2$ en orange ; $k = 5$ en noir ; $k = 8$ en rouge). Les résultats EIM (marqueurs évidés) et EF (marqueurs en croix) sont comparés en extension uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$	58

3.14	<i>Oblate</i> anisotrope (ori. cristalline : $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$) et $k = 5$ - évolution de la contrainte équivalente de von Mises en fonction de la distance à l'interface avec l'inclusion, le long de l'axe global X_2 , pour différentes orientations spatiales ($\theta = 7^\circ$ en bleu ; $\theta = 45^\circ$ en orange ; $\theta = 90^\circ$ en gris). Les résultats EIM (marqueurs évidés) et EF (marqueurs en croix) sont comparés en extension uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ au centroïde de l'inclusion	59
3.15	Calcul de l'effet de voisinage d'un grain A au sein d'un agrégat de Kelvin selon le modèle de Bretin avec un focus sur 3 voisins parmi les 14 voisins directs	61
3.16	Illustration des 54 octaèdres tronqués noyés dans le milieu effectif (a), avec seul le cube interne visible (b), (structure <i>Matriochka</i> , voir section 3.3) et isolés sans milieu effectif (c)	62
3.17	Illustration des 54 sphères, ordonnées en structure cubique centrée, pour laquelle la disposition des centroïdes est la plus proche possible de celle obtenue avec les octaèdres tronqués	63
3.18	Corrélation des différentes composantes de contrainte au niveau du centroïde de chacun des 54 grains de l'agrégat (chargé en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) entre - en abscisses - les valeurs de référence EF (agrégat d'octaèdres tronqués) et - en ordonnées - les valeurs prédites par Bretin-EIM	64
3.19	Corrélation des différentes composantes de contrainte au niveau du centroïde de chacun des 54 grains de l'agrégat (chargé en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) entre - en abscisses - l'agrégat EF d'octaèdres tronqués et - en ordonnées - l'agrégat EF de sphères	65
4.1	Exemples de diagramme de Voronoï 2D (a) et 3D (b)	69
4.2	Exemple de tessellation de Laguerre 2D	70
4.3	Exemple de tessellation de Johnson-Mehl à croissance isotrope (a) et anisotrope (b) des grains	70
4.4	Evolution du temps de génération de l'agrégat (en minutes) en fonction du nombre de grains (de densité de voxels constante, environ 3300 voxels par grain) - ordinateur de bureau (12 coeurs, 31 Go de mémoire)	72
4.5	Approximation sphéroïdale superposée à la morphologie polyédrique réelle d'un grain issu d'un agrégat de Voronoï	78
4.6	Exemple schématique de grain "excentrique" aux moments d'inertie très différents entre eux ; en jaune le <i>Prolate "inertiellement équivalent"</i> ; en bleu l' <i>Oblate "inertiellement équivalent"</i>	79
4.7	Visualisation de l'agrégat originel (en bleu foncé) et du positionnement 3D des 26 copies. En noir et traits pleins, les vecteurs directeurs des 6 copies colinéaires aux axes du repère global. En pointillés verts, (respectivement rouges et violets) les vecteurs directeurs des 12 copies suivant les diagonales des plans $(X_1; X_2)$, (resp. $(X_1; X_3)$ et $(X_2; X_3)$). En noir et traits/doubles points alternés, les vecteurs directeurs des 8 copies suivant les grandes diagonales	80
4.8	Schéma de principe de la méthode du cadastre	81
4.9	Application de la méthode du rayon cadastral à un grain fortement excentrique	82
4.10	Schéma de principe du <i>Balayage Radial de l'Enveloppe</i> , appliqué à un grain fortement excentrique	83

4.11	moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) . . .	84
4.12	moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$)	85
4.13	moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 6$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) . . .	86
4.14	moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 6$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$)	87
4.15	Evolution du nombre moyen de voisins avec le rayon cadastral pour un agrégat de 600 grains	88
4.16	Evolution du temps de calcul (hors génération) avec le rayon cadastral pour un agrégat de 600 grains - ordinateur de bureau (12 coeurs, 31 Go de mémoire)	89
4.17	Proportion de grains subissant une augmentation de contrainte (a) ou une diminution de contrainte (b) de plus de 10% de la valeur obtenue à $\mathcal{R}_c = 2.5$ pour un chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) - agrégat de 600 grains	90
4.18	Proportion de grains subissant une augmentation de contrainte (a) ou une diminution de contrainte (b) de plus de 10% de la valeur obtenue à $\mathcal{R}_c = 2.5$ pour un chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$) - agrégat de 600 grains	91
4.19	Vue isométrique du domaine complet maillé importé sur Abaqus (a) - Vue en transparence du domaine avec mise en évidence de la zone correspondant aux 110 grains centraux (b) - Agrandissement de l'agrégat des 110 grains centraux maillés (c) - Mise en surbrillance rouge des grains 10, 161, 366, 410 dans l'agrégat (d) - Mise en surbrillance rouge des grains 10, 161, 366, 410 au sein des 110 grains centraux (e) - Vue isolée des grains 10, 161, 366, 410 (f)	94
4.20	Évolution du nombre de voisins associés aux grains n°10, 161, 366 et 410 en fonction du rayon cadastral	95
4.21	Evolution de l'écart relatif entre GNOME et EF sur la contrainte de von Mises aux centroïdes des grains 10 (croix noires), 161 (croix vertes), 366 (croix oranges) et 410 (croix bleues) avec le rayon cadastral. Agrégat de 316L (a) et de Titane (b) chargés en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$) . . .	95
4.22	Evolution de l'écart relatif entre GNOME et EF sur la contrainte de von Mises aux centroïdes des grains 10 (croix noires), 161 (croix vertes), 366 (croix oranges) et 410 (croix bleues) avec le rayon cadastral. Agrégat de 316L (a) et de Titane (b) chargés en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$)	96

4.23	Distribution des rapports de forme des sphéroïdes inertielllement équivalents, toutes formes confondues (en noir), <i>Prolates</i> uniquement (en bleu) et <i>Oblates</i> uniquement (en rouge) - Agrégat de 110 grains	98
4.24	Agrégat de 110 grains, Titane α - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en déformation uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ - contraintes normales avec barres d'erreurs à ± 10 MPa	98
4.25	Agrégat de 110 grains, Titane α - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en déformation uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ - contraintes de cisaillement avec barres d'erreurs à ± 5 MPa	99
4.26	Agrégat de 110 grains, Titane α - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en glissement simple, tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ - contraintes normales avec barres d'erreurs à ± 10 MPa	99
4.27	Agrégat de 110 grains, Titane α - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en glissement simple, tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ - contraintes de cisaillement avec barres d'erreurs à ± 5 MPa	100
4.28	Agrégat de 110 grains, 316L - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en déformation uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ - contraintes normales avec barres d'erreurs à ± 30 MPa	100
4.29	Agrégat de 110 grains, 316L - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en déformation uniaxiale, telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ - contraintes de cisaillement avec barres d'erreurs à ± 20 MPa	101
4.30	Agrégat de 110 grains, 316L - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en glissement simple, tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ - contraintes normales avec barres d'erreurs à ± 70 MPa	101
4.31	Agrégat de 110 grains, 316L - corrélation des résultats EF et des prédictions GNOME - chargement en glissement simple, tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ - contraintes de cisaillement avec barres d'erreurs à ± 40 MPa	102
5.1	Contrainte de von Mises normalisée dans les inclusions anisotropes en fonction du rapport de forme pour les formes <i>Prolate</i> et <i>Oblate</i> , avec des OC respectives de $[-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$ et $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$, sous glissement simple et de traction uniaxiale à l'infini. Les valeurs de contrainte sont normalisées par la valeur obtenue pour une sphère avec la même orientation cristallographique	107
5.2	Inclusion anisotrope <i>Prolate</i> (OC = $[0^\circ 0^\circ 0^\circ]$, $k = 5$). Évolution de la contrainte de von Mises au centre de l'inclusion en fonction de φ pour différentes valeurs de θ , cisaillement dans le plan $(X_2; X_3)$, tel que $\sigma_{23}^0 = 1$ Pa (a); traction uniaxiale le long de l'axe X_1 , telle que $\sigma_{11}^0 = 1$ Pa (b)	108
5.3	Évolution de la contrainte de von Mises au centre d'inclusions anisotropes à $k = 5$ pour différentes OS. Inclusion <i>Prolate</i> anisotrope (OC = $[-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$), traction uniaxiale le long de l'axe global X_1 , telle que $\sigma_{11}^0 = 1$ Pa (a); Inclusion <i>Oblate</i> anisotrope (OC = $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$), traction uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\sigma_{33}^0 = 1$ Pa (b)	109
5.4	Inclusion <i>Oblate</i> anisotrope (OC = $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$, $k = 5$). Evolution de la contrainte de von Mises en fonction de la distance à l'interface le long de l'axe global X_2 , pour différentes valeurs de θ ($\psi = \varphi = 0^\circ$). Traction uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\sigma_{33}^0 = 1$ Pa	111
5.5	Inclusion <i>Oblate</i> anisotrope (OC = $[45^\circ 45^\circ 45^\circ]$, $k = 5$). Evolution de la contrainte de von Mises en fonction de la distance à l'interface le long de l'axe morphologique x_2 , pour différentes valeurs de θ ($\psi = \varphi = 0^\circ$). Traction uniaxiale le long de l'axe global X_3 , telle que $\sigma_{33}^0 = 1$ Pa	112
5.6	Visualisation d'un grain (surligné en jaune) au sein de l'agrégat modélisé par GNOME (visuel tiré de la référence Element Finis)	114

5.7	Taux de présence des formes <i>Oblates</i> parmi les grains les plus chargés des différents agrégats (de (a) à (j) et valeurs moyennes sur les 10 agrégats), pour différentes configurations (en noir, la valeur de référence dans l'agrégat tout entier), pour un chargement telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$, puis tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$, ce pour le 316L (a) puis le Titane α (b)	116
5.8	Rapports de forme parmi les grains les plus chargés des différents agrégats (de (a) à (j) et valeurs moyennes sur les 10 agrégats avec écarts-types associés), pour différentes configurations (en noir, la valeur de référence dans l'agrégat tout entier), pour un chargement tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$, puis tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$, ce pour le 316L (a) puis le Titane α (b)	117
5.9	Répartition des contraintes de von Mises moyennes (en rouge) et maximales (en bleu) dans les différents agrégats de 316L chargé en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ pour les distributions d'OC aléatoires associées	119
5.10	Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (aléatoires ici) sont représentées. Chargement en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$	119
5.11	grain <i>A</i> (n°492, en rouge) et ses cinq premiers voisins affichés (un des voisins est masqué dans cette vue) sous leur forme polyédrique initiale	121
5.12	Distribution des orientations cristallographiques (répartition des différents vecteurs c_1 projetés dans les plans $(X_2; X_3)$ (a) et $(X_1; X_3)$ (b) des grains les plus chargés des agrégats de 316L à distribution d'OC aléatoire. Les couleurs associées à chaque orientation sont attribuées de manière aléatoire	121
5.13	Répartition des contraintes de von Mises moyennes (en rouge) et maximales (en bleu) dans les différents agrégats de 316L chargés en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ pour les distributions d'OC aléatoires	123
5.14	Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (aléatoires ici) sont représentées. Chargement en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$. . .	123
5.15	grain <i>A</i> (n°205, en rouge) et ses cinq premiers voisins (n°420, 30, 360, 468, 474, par dégradés successifs de jaune) affichés sous leur forme polyédrique initiale. Le voisinage est ici nuisible (première des deux exceptions, $\sigma_{agregat}/\sigma_{Eshelby} = 1.24$, agrégat (e) figure 5.14)	124
5.16	grain <i>A</i> (n°574, en rouge) et ses cinq premiers voisins (n°561, 196, 57, 374, 526, par dégradés successifs de jaune) affichés sous leur forme polyédrique initiale. Le voisinage est ici nuisible (deuxième des deux exceptions, $\sigma_{agregat}/\sigma_{Eshelby} = 1.12$, agrégat (f) figure 5.14)	125
5.17	grain <i>A</i> (n°507, en rouge) et ses quatre voisins (n°302, 80, 566, 469, par dégradés successifs de jaune) affichés sous leur forme polyédrique initiale. Ici, le voisinage est le plus fortement bénéfique parmi les grains les plus chargés en glissement simple (pour des distributions d'OC aléatoires)	126
5.18	Distribution des orientations cristallographiques (répartition des différents vecteurs c_1 dans l'espace) des grains les plus chargés des agrégats de 316L en glissement simple pour les distributions d'OC aléatoires. Les couleurs associées à chaque orientation sont attribuées de manière aléatoire	127
5.19	Histogramme présentant les distances inter-centroïdes entre chacun des grains " <i>fortement influençables</i> " (agrégats de 316L en glissement simple - distributions aléatoire) et leurs trois premiers voisins. En pointillés, la distance inter-centroïdes moyenne dans l'agrégat	128

5.20	Représentation spatiale des demi-grands axes du sphéroïde <i>Oblate</i> aplati approximant la forme du grain n°103 (en orange semi-transparent) et la droite reliant le centroïde du grain n°103 au centroïde du grain n°492 (en bleu semi-transparent, avec son orientation spatiale associée) qu'il influence. Les tailles et distances ne sont pas à l'échelle	132
5.21	Répartition des contraintes de von Mises moyennes (en rouge) et maximales (en bleu) dans les différents agrégats de Titane α chargé en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ pour les distributions d'OC aléatoires (\times) et de Burgers (+) associées	133
5.22	Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (aléatoires ici) sont représentées. Chargement en déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$	134
5.23	grain A (n°293, en rouge) et son premier voisin (n°397, en jaune) (a) grain A (n°293, en rouge) et son deuxième voisin (n°546, en jaune) (b) affichés sous leur forme polyédrique initiale. A noter que les échelles sont différentes entre les deux figures	135
5.24	Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (de Burgers ici) sont représentées. Chargement en déformation uniaxiale tel que $\varepsilon_{33} = 0.001$	135
5.25	Distribution 3D des orientations cristallographiques des grains les plus chargés des agrégats de Titane en déformation uniaxiale à distributions d'OC aléatoires (a) et de Burgers (b). Les couleurs associées à chaque orientation sont attribuées de manière aléatoire	136
5.26	Répartition des contraintes de von Mises moyennes (en rouge) et maximales (en bleu) dans les différents agrégats de Titane α chargé en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ pour les distributions d'OC aléatoires (\times) et de Burgers (+) associées	137
5.27	Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (aléatoires ici) sont représentées. Chargement en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$. . .	138
5.28	grain A (n°570, en rouge) et son premier (n°259, en jaune), deuxième (n°227, en vert) et troisième (n°559, en bleu) voisins affichés sous leur forme polyédrique initiale	139
5.29	Répartition des ratios de contraintes pour les grains les plus chargés avec et sans voisinage. Pour chaque agrégat, les 10 distributions (de Burgers ici) sont représentées. Chargement en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$. . .	139
5.30	Distribution des orientations cristallographiques (répartition des différents vecteurs c_1 dans l'espace) des grains les plus chargés des agrégats de Titane sous glissement simple à distributions d'OC aléatoires (a) et de Burgers (b). Les couleurs associées à chaque orientation sont attribuées de manière aléatoire	140
5.31	Histogramme présentant les distances inter-centroïdes entre chacun des grains "fortement influençables" (agrégats de Titane α en glissement simple - distributions aléatoire) et leurs trois premiers voisins. En pointillés, la distance inter-centroïdes moyenne dans l'agrégat	141
5.32	Rapport de forme des sphéroïdes équivalents approximant les formes pour les 12 carbures des microstructures C01 à C05 (a) et C06 à C10 (b)	143
5.33	Volume des sphéroïdes équivalents approximant les formes pour les 12 carbures des microstructures C01 à C05 (a) et C06 à C10 (b)	143
5.34	Nombre de voisins pour les 12 carbures des microstructures C01 à C05 (a) et C06 à C10 (b) pour un rayon cadastral $\mathcal{R}_C = 6$	144

5.35	Corrélation des contraintes de von Mises interne à chaque carbure, pour les dix microstructures concernées, pour un chargement tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (a) puis tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ (b) entre configuration avec voisinage (en ordonnée) et sans (en abscisse). Les pires cas, étudiés ensuite, sont entourés en rouge	145
5.36	Carbure C09-5 isolé (a) et entouré de ses deux premiers voisins (b). Carbure C01-1 isolé (c) et entouré de ses quatre premiers voisins (d)	146
5.37	Corrélation des contraintes aux centroïdes des grains avec existence des carbures dans la microstructure et sans, pour un chargement respectivement tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (a) et $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ (b), tous grains de toutes les microstructures confondus. Les cas extrême, étudiés ensuite, sont entourés en rouge	148
5.38	Vue partielle du voisinage du grain C10-g76 (en bleu) avec les carbures du voisinage (en rouge)(a); Vue partielle du voisinage du grain C09-g230 (en bleu) avec les carbures du voisinage (en rouge)(b)	149
7.1	Rotation de précession autour de l'axe X_3 d'amplitude ψ	164
7.2	Rotation de nutation autour de l'axe X'_1 d'amplitude θ	164
7.3	Rotation propre autour de l'axe X''_3 d'amplitude φ	165
7.4	Etude de convergence (schéma (a); graphe (b)) dans le cas d'un sphéroïde <i>Oblate</i> (cavité) en glissement simple tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$. Les tailles sont données en mm	168
7.5	Etude de convergence (schéma (a); graphe (b)) dans le cas d'un <i>Prolate</i> anisotrope chargé en déformation uniaxiale tel que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$. Les tailles sont données en mm	169
7.6	moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en déformation uniaxiale ($\varepsilon_{33}^0 = 0.001$)	171
7.7	moyenne arithmétique des contraintes aux centroïdes des grains pour chacune des 10 distributions d'OC, et moyenne arithmétique (losange blanc) et écart-type sur les 10 distributions en fonction du nombre de grains dans l'agrégat pour $\mathcal{R}_c = 2.5$. Composante σ_{11} (a), σ_{22} (b), σ_{33} (c), σ_{23} (d), σ_{31} (e), σ_{12} (f) - chargement externe en glissement simple ($\varepsilon_{12}^0 = 0.001$)	172
7.8	Schéma de principe de l'insertion de carbures dans une microstructure constituée. Microstructure* avant insertion des carbures (a). Microstructure après sélection de tous les sites favorables non-intragranulaires** (b). Schéma de principe de l'insertion de carbures dans une microstructure constituée. Microstructure après germination des carbures parmi les sites favorables disponibles et la définition de leur enveloppe géométrique caractéristique (c). Microstructure après réassignation des voxels appartenant aux domaines des carbures (d)	174
7.9	Corrélation entre les résultats du GNOME relevés aux centroïdes et les moyennes volumiques par grain pour une déformation uniaxiale selon l'axe X_3 telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ (agrégat de 686 grains)	181
7.10	Corrélation entre les résultats du GNOME relevés aux centroïdes et les moyennes volumiques par grain pour un glissement simple dans le plan ($X_1; X_2$) tel que $\varepsilon_{12}^0 = 0.001$ (agrégat de 686 grains)	181

Liste des tableaux

3.1	Jeu de simulations réalisées pour la validation EIM à propriétés matériaux et rapport de forme ($k = 5$) fixés (a) et Propriétés matériaux considérées (b)	53
5.1	Comparaison entre les chemins global (tableau haut) et morphologique (tableau bas) des valeurs de contrainte à l'interface dans la matrice, des écarts maximums et de leur localisation pour les différentes orientations de l'inclusion	112
5.2	Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain critique A (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)	120
5.3	Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain A (première des deux exceptions, $\sigma_{agregat}/\sigma_{Eshelby} = 1.24$, agrégat (e) figure 5.14) au voisinage nuisible (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)	124
5.4	Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du deuxième grain A au voisinage nuisible (en rouge, deuxième des deux exceptions, $\sigma_{agregat}/\sigma_{Eshelby} = 1.12$, agrégat (f) figure 5.14) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)	125
5.5	Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain critique (au voisinage le plus <i>fortement bénéfique</i>) (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)	126
5.6	Projection pour un chargement de déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$ des modules d'Young suivant X_3 des cinq premiers voisins et écart relatif par rapport à la rigidité projetée maximale	129
5.7	Projection pour un chargement de déformation uniaxiale telle que $\varepsilon_{11}^0 = 0.001$ des modules d'Young suivant X_1 des cinq premiers voisins et écart relatif par rapport à la rigidité projetée maximale	129
5.8	Effet des cinq premiers voisins au point correspondant au centroïde du grain A avec leurs OC initiales et avec les OC à $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$, pour un chargement en déformation uniaxiale suivant X_3 telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$	130
5.9	Effet des cinq premiers voisins au point correspondant au centroïde du grain A avec leurs OC initiales et avec les OC à $[-45^\circ \ -45^\circ \ 0^\circ]$, pour un chargement en déformation uniaxiale suivant X_1 telle que $\varepsilon_{11}^0 = 0.001$	130
5.10	Effet des cinq premiers voisins au point correspondant au centroïde du grain A avec leurs OC initiales et avec les OC à $[45^\circ \ 45^\circ \ 45^\circ]$ lorsqu'ils sont avec la position relative "optimale", pour un chargement en déformation uniaxiale suivant X_3 telle que $\varepsilon_{33}^0 = 0.001$	131

5.11	Effet des cinq premiers voisins au point correspondant au centroïde du grain A avec leurs OC initiales et avec les OC à $[-45^\circ -45^\circ 0^\circ]$ lorsqu'ils sont avec la position relative "optimale", pour un chargement en déformation uniaxiale suivant X_1 telle que $\varepsilon_{11}^0 = 0.001$	131
5.12	Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain critique A (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)	134
5.13	Caractéristiques comparées des premiers voisins (en jaune) du grain critique A (en rouge) par rapport aux moyennes relevées dans les différents agrégats (en bleu)	138

Liste des Algorithmes

3.1	Principe général du module EIM	57
4.1	Algorithme décrivant le Module de Génération d'Agrégats	73
4.2	Algorithme général de l'outil GNOME	74
7.1	Algorithme de génération de carbures sphériques	175
7.2	Algorithme de génération de carbures sphériques	176
7.3	Algorithme de génération de carbures sphéroïdaux	177
7.4	Algorithme de génération de carbures sphéroïdaux	178
7.5	Algorithme de génération de carbures sphéroïdaux	179

Références Bibliographiques

- [Adamatzky et al., 2010] : Adamatzky A., Martinez G., Zhang L., Wuensche A. (2010) *Operating binary strings using gliders and eaters in reaction-diffusion cellular automaton*, Mathematical and Computer Modelling, vol.52, pp.177-190
- [Adessi et al., 2023] : Adessi D., Di Re P., Gatta C., Sacco E. (2023) *Non-Uniform TFA reduced multiscale procedure for shell-3D modeling of periodic masonry structures*, Mechanics Research Communications, vol.130, pp.104122
- [Agoras et al., 2016] : Agoras M., Avazmohammadi R., Ponte Castaneda P. (2016) *Incremental variational procedure for elasto-viscoplastic composites and application to polymer- and metal-matrix composites reinforced by spherical elastic particles*, International Journal of Solids and Structures, vol.97-98, pp.668-686
- [Alizadeh, 2011] : Alizadeh R. (2011) *A dynamic cellular automaton model for evacuation process with obstacles*, Safety Science, vol.49, pp.315-323
- [Altendorf et al., 2014] : Altendorf H., Latourte F., Jeulin D., Faessel M., Saintoyant L. (2014) *3D Reconstruction of a Multiscale Microstructure by anisotropic tessellation models*, Image Analysis and Stereology, vol.33, pp.121-130
- [Ammar et al., 2011] : Ammar A., Chinesta F., Cueto E. (2011) *Coupling finite elements and propergeneralized decompositions*, International Journal for Multiscale Computational Engineering, vol.9, pp.17-33
- [Ayadi, 2017] : Ayadi S. (2017) *Fissuration induite par l'hydrogène de polycristaux de fer déformés plastiquement : Analyse expérimentale et simulation numérique*, Université Paris 13, Institut Galilée, Université Sorbonne, Paris-Cité, thèse de doctorat
- [Babei et al., 2023] : Babai H., Pratoori R., Levitas V. (2023) *Simulations of multivariant Si I to Si II phase transformation in polycrystalline silicon with finite-strain scale-free phase-field approach*, Acta Materialia, vol.254, pp.118996
- [Bannon, 2018] : Bannon R. (2018) *Rotation, Reflection, and Frame Changes. Orthogonal tensors in computational engineering mechanics - chapter 26 : Voigt and Mandel components*, IOP Publishing Limited
- [Barbe, 2001] : Barbe F. (2001) *Etude Numérique de la Plasticité d'Agrégats Polycristallins*, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, thèse de doctorat

- [Bardella et al., 2012] : Bardella L., Sfreddo A., Ventura C., Porfiri M., Gupta N. (2012) *A critical evaluation of micromechanical models for syntactic foams*, Mechanics of Materials, vol.50, pp.53-69
- [Basseville et al., 2013] : Basseville S., Guilhem Y., Proudhon H., Ghidossi T., Signor L., Villechaise P., Cailletaud G. (2013) *Etude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins sous chargements cycliques*, CFM2013, 21eme Congrès Français de Mécanique, Aug 2013, Bordeaux, France
- [Basseville et al., 2017] : Basseville S., Cailletaud G., Ghidossi T., Guilhem Y., Lacoste E., Proudhon H., Signor L., Villechaise P. (2017) *Numerical analysis on the local mechanical fields in polycrystalline 316LN stainless steel under cyclic fatigue loading : Comparison with experimental results*, Materials Science and Engineering : A, vol.696, pp.122-136
- [Belkhabbaz et al., 2011] : Belkhabbaz A., Brenner R., Rupin N., Bacroix B., Fonseca J. (2011) *Prediction of the overall behavior of a 3D microstructure of austenitic steel by using FFT numerical scheme*, Procedia Engineering, vol.10, pp.1883-1888
- [Benveniste et al., 1991] : Benveniste Y., Dvorak G., Chen T. (1991) *On diagonal and elastic symmetry of the approximate effective stiffness tensor of heterogeneous media*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.39, No.7, pp.927-946
- [Berbenni et al., 2015] : Berbenni S., Dinzart F., Sabar H. (2015) *A new internal variables homogenization scheme for linear viscoelastic materials based on an exact Eshelby interaction law*, Mechanics of Materials, vol.81, pp.110-124
- [Beringhier et al., 2010] : Beringhier M., Gueguen M., Grandidier J.-C. (2010) *Solution of Strongly Coupled Multiphysics Problems Using Space-Time Separated Representations-Application to Thermoviscoelasticity*, Archives of Computational Methods in Engineering, vol.17, pp.393-401
- [Berveiller & Zaoui, 1979] : Berveiller M., Zaoui A. (1979) *An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.26, pp.325-344
- [Billaud-Friess et al., 2014] : Billaud-Friess M., Nouy A., Zahm O. (2014) *A tensor approximation method based on ideal minimal residual formulations for the solution of high-dimensional problems*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol.48, pp.1777-1806
- [Billaudeau et al., 2004] : Billaudeau T., Nadot Y., Bezine G. (2004) *Multiaxial fatigue limit for defective materials : mechanisms and experiments*, Acta Materialia, vol.52, pp.3911-3920
- [Bognet et al., 2010] : Bognet B., Leygue A., Chinesta F., Poitou A. (2010) *PGD and Separated Space Variables Representation for Linear Elasticity in 3D representation of Plate Domains*, AIP Conference Proceedings, vol.1315, pp.203-208
- [Bonamente, 2016] : Bonamente M. (2016) *Statistics and Analysis of Scientific data - Second edition*, Springer Science, Business Media LLC2017
- [Bornert et al., 2001] : Bornert M., Bretheau T., Gilormini P. (2001) *Homogénéisation en mécanique des matériaux. Volume 1 : Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*, Hermes Science Europe Limited, ISBN 2-7462-0199-2

- [Bretin *et al.*, 2019a] : Bretin R., Levesque M. and Bocher P. (2019) *Neighborhood effect on the strain distribution in linearly elastic polycrystals : Part 1 - Finite element study of the interaction between grains*, International Journal of Fatigue, vol. 176-177, pp.36-48
- [Bretin *et al.*, 2019b] : Bretin R., Levesque M. and Bocher P. (2019) *Neighborhood effect on the strain distribution in linearly elastic polycrystals : Part 2 - Cellular Automaton*, International Journal of Fatigue, vol.176-177, pp.49-67
- [Bretin, 2020] : Bretin R. (2020) *The Neighborhood Effect within Polycrystals Stress-Fields and Development of a Cellular Automaton Model Accounting for it*, Ecole de Technologie Supérieure, thèse de doctorat
- [Bretin *et al.*, 2020] : Bretin R., Levesque M., Pilvin P. and Bocher P. (2020) *Neighborhood effect within polycrystalline materials : elastoplastic micromechanical analysis by cellular automaton and finite element*, International Journal of Fatigue, vol.137, pp.105634
- [Burgers, 1934] : Burgers W. (1934) *On the process of transition of the cubic-body-centered modification into the hexagonal-close-packed modification of zirconium*, Physica, vol.1, Issues 7-12, pp.561-586
- [Cailletaud & Pilvin, 1994] : Cailletaud G., Pilvin P. (1994) *Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments Finis*, Revue Européenne des Elements Finis, vol.3, no.4; pp.515-541
- [Cailletaud *et al.*, 2003] : Cailletaud G., Forest S., Jeulin D., Feyel F., Galliet I., Mounoury V., Quilici S. (2003) *Somes elements of microstructural mechanics*, Computational Materials Science, vol.27, pp.351-374
- [Cailletaud & Coudon, 2016] : Cailletaud G., Coudon F. (2016) *Scale Transition Rules Applied to Crystal Plasticity*. In Mechanical Engineering, P. trovalusci Editions, Materials with Internal Structure, Springer Tracts, DOI 10.1007/978-3-319-21494-8_1
- [Carroll *et al.*, 2012] : Carroll J., Brewer L., Battaile C., Boyce B., Emery J. (2012) *The effect of grain size on local deformation near a void-like stress concentration*, International Journal of Plasticity, vol.39, pp.46-60
- [Chapetti *et al.*, 2023] : Chapetti M., Gubeljak N., Kozak D. (2023) *Intrinsic Fatigue Limit and the Minimum Fatigue Crack Growth Threshold*, Materials, vol. 16, pp.5874-5894
- [Chauve *et al.*, 2017] : Chauve T., Montagnat M., Lachaud C., Georges D., Vacher P. (2017) *Strain field evolution at the ductile-to-brittle transition : a case study on ice*, Solid Earth, vol.8, pp.943-953
- [Chen *et al.*, 2011] : Chen K., Chan K.-S., Bailey K., Aydin K., Ciannelli L. (2011) *A probabilistic cellular automata approach for predator-prey interactions of arrowtooth flounder (Atheresthes stomias) and walleye pollock (Theragra chalcogramma) in the Eastern Bering Sea*, Canadian Journal of Fisheries Aquatic Sciences, vol.69, 259-272
- [Chinesta *et al.*, 2013] : Chinesta F., Keunings R., Leygue A. (2013) *The Proper Generalized Decomposition for Advanced Numerical Simulation*, SpringerBriefs in Applied Sciences and Technology, Springer, pp.27-30
- [Chniouel, 2019] : Chniouel A. (2019) *Etude de l'élaboration de l'acier inoxydable 316L par fusion laser sélective sur lit de poudre : influence des paramètres du procédé, des caractéristiques de la poudre, et des traitements thermiques sur la microstructure et les propriétés mécaniques*, Université Paris-Saclay, Université Paris-Sud, thèse de doctorat

- [Courtier, 2013] : Courtier V. (2013) *Réduction de modèle et simplification de l'intégration de loi de comportement pour la prévision de la durée de vie*, Ecole Polytechnique X, thèse de doctorat
- [Cruz-Gonzalez et al., 2024] : Cruz-Gonzalez O., Cornaggia R., Dartois S., Brenner R. (2024) *Accounting for spatial distribution in mean-field homogenization of particulate composites*, International Journal of Solids and Structures, vol.294, pp.112747
- [Czarnota et al., 2015] : Czarnota C., Kowalczyk-Gajewska K., Salahouelhadj A., Martiny M., Mercier S. (2015) *Modeling of the cyclic behavior of elastic-viscoplastic composites by the additive tangent Mori-Tanaka approach and validation by finite element calculations*, International Journal of Solids and Structures, vol.56-57, pp.96-117
- [Dahal & Chow, 2014] : Dahal K., Chow T. (2014) *Characterization of neighborhood sensitivity of an irregular cellular automata model of urban growth*, International Journal of Geographical Information Science, vol.29, no.3, pp.475-497
- [Damon et al., 2018] : Damon J., Dietrich S., Vollert F., Gibmeier J., Schulze V. (2018) *Process dependent porosity and the influence of shot peening on porosity morphology regarding selective laser melted AlSi10Mg parts*, Additive Manufacturing, vol.20, pp.77-89
- [Dawson & Boyce, 2018] : Dawson P., Boyce D. (2018) *FEPX - Finite Element Polycrystals Theory, Finite Element Formulation, Numerical Implementation and Illustrative Examples*, DOI : 10.48550/arXiv.1504.03296
- [Delaunay, 1934] : Delaunay B. (1934) *Sur la sphère vide. A la mémoire de Georges Voronoï*, Bulletin de l'Académie des Sciences de l'URSS. Classe des sciences mathématiques et naturelles, Is.6, pp.793-800
- [Despret, 2015] : Despret P. (2015) *Simulation numérique de la solidification avec réduction de modèle PGD appliquée à la fonderie*, Université de Technologie de Compiègne, thèse de doctorat
- [Djaka, 2017] : Djaka K. (2017) *Développement et applications d'une technique de modélisation micromécanique de type "FFT" couplée à la mécanique des champs de dislocations*, Université de Lorraine, thèse de doctorat
- [Djaka et al., 2018] : Djaka K., Villani A., Taupin V., Capolungo L., Berbenni S. (2018) *Field Dislocation Mechanics for heterogeneous elastic materials : A numerical spectral approach*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.315, pp.921-942
- [Duschlbauer, et al., 2005] : Duschlbauer D., Böhm H., Pettermann H. (2005) *Computational simulation of composites reinforced by planar random fibers : Homogenization and localization by unit cell and mean field approaches*, Journal of Composites Materials, vol.40, No.24, pp.2217-2234
- [Dvorak, 1992] : Dvorak G. (1992) *Transformation field analysis of inelastic composite materials*, Proceeding of the Royal Society of London. Serie A, Mathematical and Physical Sciences, vol.437, pp.311-327
- [Dvorak et al., 1994] : Dvorak G., Bahei-El-Din Y., Wafa A. (1994) *The modeling of inelastic composite materials with the transformation field analysis*, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol.2, pp.571-586

- [Echerradi, 2023] : Echerradi I. (2023) *Modèle rapide de plasticité cristalline dans les polycristaux pour la fatigue à grand nombre de cycles*, Ecole des Ponts ParisTech, thèse de doctorat
- [El Abdi, 2021] : El Abdi A. (2021) *Génération 3D aléatoire de microstructures de combustibles nucléaires MOX et homogénéisation mécanique*, Aix-Marseille université, thèse de doctorat
- [Eshelby, 1957] : Eshelby J. D. (1957) *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems*, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. vol.241(1226), pp.376-396
- [Eshelby, 1959] : Eshelby J. D. (1959) *The elastic field outside an ellipsoidal inclusion*, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. vol.252(1271), pp.561-569
- [Eshelby, 1961] : Eshelby JD. *Elastic inclusions and inhomogeneities* In : Sneddon IN, Hill R, editors, Progress in solid mechanics 2. Amsterdam : North-Holland Publishing Company ; 1961, p.89-140
- [Eyre & Milton, 1999] : Eyre D., Milton G. (1999) *A fast numerical scheme for computing the response of composites using grid refinement*, European Physical Journal Applied Physics, vol.6, pp.41-47
- [Fish et al., 1997] : Fish J., Shek K., Pandheeradi M., Shephard M. (1997) *Computational plasticity for composite structures based on mathematical homogenization : Theory and practice*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.148, pp.53-73
- [Fish & Yu, 2002] : Fish J., Yu Q. (2002) *Computational mechanics of fatigue and life predictions for composite materials and structures*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.191, pp.4827-4849
- [Fortune, 1992] : Fortune S. (1992) *Voronoi diagrams and Delaunay triangulations*, Handbook of Discrete and Computational Geometry, 2nd Ed.
- [Fressengeas & Upadhyay, 2020] Fressengas C., Upadhyay M. (2020) *A continuum model for slip transfer at grain boundaries*, Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences, vol.7, No.12, pp.1-19
- [Fritzen & Böhlke, 2010] : Fritzen F., Böhlke T. (2010) *Three-dimensional finite element implementation of the nonuniform transformation field analysis*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol.84, pp.803-829
- [Fritzen & Leuschner, 2013] : Fritzen F., Leuschner M. (2013) *Reduced basis hybrid computational homogenization based on a mixed incremental formulation*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.260, pp.143-154
- [Furstoss et al., 2021] : Furstoss J., Petit C., Ganino C., Bernacki M., Pino-Munoz D. (2021) *A new finite element approach to model microscale strain localization within olivine aggregates*, Solid Earth, vol.12, pp.2369-2385
- [Ganapathysubramanian & Zabaras, 2004] : Ganapathysubramanian S., Zabaras N. (2004) *Design across length scales : a reduced-order model of polycrystal plasticity for the control of microstructure-sensitive material properties*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.193(45-47), pp.5017-5034

- [Ganapathysubramanian & Zabaras, 2008] : Ganapathysubramanian B., Zabaras N. (2008) *A non-linear dimension reduction methodology for generating data-driven stochastic input models*, Journal of Computational Physics, vol.227, pp.6612-6637
- [Ghnatios et al., 2010] : Ghnatios C., Chinesta F., Cueto E., Leygue A., Poitou A. (2010) *Optimizing Composites Forming Processes by Applying the Proper Generalized Decomposition*, Advances in Material Processing Technologies, pp.197-202
- [Gilormini, 1997] : Gilormini P. (1997) *Une insuffisance de plusieurs extensions du modèle autocohérent au comportement des milieux hétérogènes non linéaires*, La Revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des Matériaux, Sept.1997, pp.1081-1087
- [Grennerat, 2006] : Grennerat F. (2006) *Hétérogénéités de déformation au cours du fluage transitoire de la glace polycristalline. Mesures par corrélation d'images numériques et modélisation*, Université de Grenoble, thèse de doctorat
- [Guilhem et al., 2010] : Guilhem Y., Basseville S., Curtit F., Stephan J.-M., Cailletaud G. (2010) *Investigation of the effect of grain clusters on fatigue crack initiation in polycrystals*, International Journal of Fatigue, vol., 32, pp.1748-1763
- [Guilhem, 2011] : Guilhem Y. (2011) *Etude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue*, Ecole des Mines de Paris, thèse de doctorat
- [Guilhem et al., 2018] : Guilhem Y., Basseville S., Curtit F., Stéphan J.-M., Cailletaud G. (2018) *Numerical analysis on the effect of surface roughness on the mechanical fields in polycrystalline aggregates*, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol.26, No.4, pp.045004
- [Guillon, 2008] : Guillon P. (2008) *Automates Cellulaires : dynamiques, simulations, traces*, Université Paris-Est, thèse de doctorat
- [Haboussa, 2014] : Haboussa D. (2014) *Comportements élastoviscoplastiques mono et polycristallins*, Code_Aster, R5.03.11, consulté sur <http://ericca.uqtr.ca/fr12.4/R.html>
- [Hashin & Shtrikman, 1962a] : Hashin Z., Shtrikman S. (1962) *A variational approach to the theory of the elastic behavior of multiphase materials*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.11, pp.127-140
- [Hashin & Shtrikman, 1962b] : Hashin Z., Shtrikman S. (1962) *A variational approach to the elastic behavior of polycrystals*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.10, pp.343-352
- [Hashin & Shtrikman, 1962c] : Hashin Z., Shtrikman S. (1962) *On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.10, pp.335-342
- [Hemery et al., 2019] Hemery S., Nait-Ali A., Gueguen M., Wendorf J., Polonsky A., Echlin M., Stinville J., Pollock T., Villechaise P. (2019) *A 3D analysis of the onset of slip activity in relation to the degree of micro-texture in Ti-6Al-4V*, Acta Materialia, vol. 181, pp.36-48
- [Heyberger et al., 2013] : Heyberger C., Boucard P.-A., Neron D. (2013) *A rational strategy for the resolution of parametrized problems in the PGD framework*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.259, pp.40-49

- [Hill, 1965] : Hill R. (1965) *Continuum Micro-Mechanics of Elastoplastic Polycrystals*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.13, pp.89-101
- [Hill, 1965b] : Hill R. (1965) *A self-consistent mechanics of composite materials*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.13, pp.213-222
- [Holmes et al., 1997] : Holmes P., Lumley J., Berkooz G., Mattingly J., Wittenberg R. (1997) *Low-dimensional models of coherent structures in turbulence*, Physics Reports, vol.287, pp.337-384
- [Idiart et al., 2020a] : Idiart M., Lahellec N., Suquet P. (2020) *Model reduction by mean-field homogenization in viscoelastic composites. I. Primal theory*, Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Science, vol.476, pp.20200407
- [Idiart et al., 2020b] : Idiart M., Lahellec N., Suquet P. (2020) *Model reduction by mean-field homogenization in viscoelastic composites. II. Application to rigidly reinforced solids*, Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Science, vol.476, pp.20200408
- [Jayachandran et al., 2009] : Jayachandran K., Guedes J., Rodrigues H. (2009) *Homogenization of textured as well as randomly oriented ferroelectric polycrystals*, Computational Materials Science, vol.45, pp.816-820
- [Jeon et al., 2023] : Jeon B., Kim M.-S., Choi S.-H., Jeong Y. (2023) *Finite element analysis using elasto-visco-plastic self-consistent polycrystal model for E-form Mg sheet subjected to bending*, Journal of Magnesium and Alloys, vol.11, pp.1393-1407
- [Johnson & Mehl, 1939] : Johnson W., Mehl R. (1939) *Reaction kinetics in processes of nucleation and growth*, Transactions AIME, vol. 135, pp. 41658.
- [Kanit et al., 2003] : Kanit T., Forest S., Galliet I., Mounoury V., Jeulin D. (2003) *Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach*, International Journal of Solids and Structures, vol.40, pp.3647-3679
- [Kattan & Voyiadjis, 1993] : Kattan P., Voyiadjis G. (1993) *Overall damage and elastoplastic deformation in fibrous metal matrix composites*, International Journal of Plasticity, vol.9, pp.931-949
- [Klöcker et al., 1998] : Klöcker H., Berger E., Damamme G. (1998) *Expression simplifiée du tenseur de polarisation pour une matrice isotrope transverse*, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, tome 326, Série II, pp.799-804
- [Kröner, 1961] : Kröner E. (1961) *Zur Plastischen Vergummung des Vielkristalls*, Acta Metallurgica, vol.9, pp.155-161
- [Kurdjumow & Sachs, 1930] : Kurdjumow G., Sachs G. (1930) *Über den Mechanismus der Stahlhärtung*, Zeitschrift für Physik, Bd.64, pp.325-343
- [Labat et al., 2022] : Labat J., Larenton R., Michel J.-C., Michel B. (2022) *Multiscale modelling of polycrystalline UO₂ : full-field simulations (FFT) and model-reduction approach (NTFA)*, 25ème Congrès Français de Mécanique, Aug. 2022, Nantes, France
- [Lahellec & Suquet, 2007] : Lahellec N., Suquet P. (2007) *On the effective behavior of non-linear inelastic composites : I. Incremental variational principles*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.55, No.9, pp.1932-1963

- [Lahellec & Suquet, 2013] : Lahellec N., Suquet P. (2013) *Effective response and field statistics in elasto-plastic and elasto-viscoplastic composites under radial and non-radial loadings*, International Journal of Plasticity, vol.42, pp.1-30
- [Lahellec et al., 2021] : Lahellec N., Idiart M., Suquet P. (2021) *Model reduction by mean-field homogenization in viscoelastic composites. III. Dual theory*, Proceeding of the Royal Society of London. Series A : Mathematics, Physics and Engineering Sciences, vol.476, pp.20200869
- [Lamari et al., 2010] : Lamari H., Ammar A., Cartraud P., Legrain G., Chinesta F., Jacquemin F. (2010) *Routes for Efficient Computational Homogenization of Nonlinear Materials Using the Proper Generalized Decompositions*, Archives of Computational Methods in Engineering, vol.17, pp.373-391
- [Largenton et al., 2014] : Largenton R., Michel J.-C., Suquet P. (2014) *Extension of the Nonuniform Transformation Field Analysis to linear viscoelastic composites in the presence of aging and swelling*, Mechanics of Materials, vol.73, pp.76-100
- [Largenton et al., 2019] : Largenton R., Michel J.-C., El Abdi A., Suquet P. (2019) *Extension of the Nonuniform Transformation Field Analysis using Tangent Second-Order expansion to nonlinear viscoelastic composites in the presence of aging and swelling*, 24ème Congrès Français de Mécanique, Aug. 2019, Brest, France
- [Lautensack, 2007] : Lautensack C. (2007) *Random Laguerre Tessellations*, Universität Karlsruhe, Dissertation
- [Lautensack & Zuyev, 2008] : Lautensack C., Zuyev S. (2008) *Random Laguerre Tessellations*, Advances in Applied Probability, vol.40, pp.630-650
- [Lebensohn, 2001] : Lebensohn R. (2001) *N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using fast Fourier transform*, Acta Materialia, vol.49, pp.2723-2737
- [Lebensohn et al., 2004] : Lebensohn R., Liu Y., Ponte Castaneda P. (2004) *On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals : comparison with full-field numerical simulations*, Acta Materialia, vol.52, pp.5347-5361
- [Lebensohn et al., 2020] : Lebensohn R., Ponte Castaneda P., Brenner R., Castelnau O. (2020) *Full-field vs. homogenization methods to predict microstructure-property relations for polycrystalline materials*, Computational Methods for Microstructure-Property Relationships, Springer, pp.393-441
- [Le Biavant et al., 2001] : Le Biavant K., Pommier S., Prioul C. (2001) *Local texture and fatigue crack initiation in a Ti-6Al-4V titanium alloy*, Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, vol.25, pp.527-545
- [Lin, 1957] : Lin T. (1957) *Analysis of Elastic and Plastic strains of a Face-Centred Cubic Crystal*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.5, pp.143-149
- [Liu et al., 2016] : Liu Z., Bessa M., Liu W. (2016) *Self-Consistent clustering analysis : An efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials*, Computational Methods in Applied Mechanical and Engineering, vol.306, pp.319-341
- [Liu et al., 2018] : Liu Z., Kafka O., Yu C., Liu W. (2019) *Data-driven self-consistent clustering analysis of heterogeneous materials with crystal plasticity*, Advances in Computational Plasticity, Computational Methods in Applied Sciences, vol. 46

- [Lorrain, 2004] : Lorrain J.-P. (2004) *Critère de ductilité basé sur la perte d'ellipticité du module tangent elastoplastique déduit d'un modèle autocohérent*, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Centre de Metz, thèse de doctorat
- [Lucchetta et al., 2019] : Lucchetta A., Auslender F., Bornert M., Kondo D. (2019) *A double incremental variational procedure for elastoplastic composites with combined isotropic and linear kinematic hardening*, International Journal of Solids and Structures, vol.158, pp.243-267
- [Lumley, 1967] : Lumley J. (1967) *The structure of inhomogeneous turbulence*, in A.M. Yaglom & V.I. Tatars Ed., Atmospheric Turbulence and Wave Propagation, Nauka, Moscow, pp.166-178
- [Marano, 2019] : Marano A. (2019) *Numerical simulation of strain localization in irradiated polycrystals*, Université PSL, Mines ParisTech, thèse de doctorat
- [Marciszko-Wiackowska et al., 2023] : Marciszko-Wiackowska M., Baczmanski A., Braham C., Watroba M., Wronski S., Wawszczak R., Gonzalez G., Kot P., Klaus M., Genzel C. (2023) *Stress evolution in plastically deformed austenitic and ferritic steels determined using angle- and energy-dispersive diffraction*, Material Characterization, vol.203, 113114
- [Martin, 2012] : Martin G. (2012) *Simulation numérique multi-échelles du comportement mécanique des alliages de titane bêta-métastable Ti5553 et Ti17*, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, thèse de doctorat
- [Ménard & Marceau, 2006] : Ménard A., Marceau D. (2006) *Simulating the impact of forest management scenarios in an agricultural landscape of southern Quebec, Canada, using a geographic cellular automata*, Landscape and Urban Planning, vol.79, pp.253-265
- [Mercier et al., 2012] : Mercier S., Molinari A., Berbenni S., Berveiller M. (2012) *Comparison of different homogenization approaches for elastic-viscoplastic materials*, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol.20, pp.024004
- [Michel et al., 2000] : Michel J.-C., Galvanetto U., Suquet P. (2000) *Constitutive relations involving internal variables based on a micromechanical analysis*, In : Maugin, G.A., Drouot, R., Sidoroff, F. (eds) Continuum Thermomechanics. Solid Mechanics and its Applications, vol. 76, Springer, Dordrecht
- [Michel & Suquet, 2003] : Michel J.-C., Suquet P. (2003) *Nonuniform Transformation Field Analysis*, International Journal of Solids and Structures, vol.40, Issue 25, pp.6937-6955
- [Michel & Suquet, 2009] : Michel J.-C., Suquet P. (2009) *Nonuniform transformation field analysis : a reduced model for multiscale nonlinear problems in solid mechanics*, Multiscale Modelling in Solid Mechanics - Computational Approaches, Imperial College Press, London., pp.159-206
- [Michel & Suquet, 2016] : Michel J.-C., Suquet P. (2016) *A model-reduction approach in micromechanics of materials preserving the variational structure of constitutive relations*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.90, pp.254-285
- [Michel & Suquet, 2017] : Michel J.-C., Suquet P. (2017) *Effective potentiels in nonlinear polycrystals and quadrature formulae*, Proceeding of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physics and Engineering Sciences, vol.473, pp.20170213
- [Mika & Dawson, 1998] : Mika D., Dawson P. (1998) *Effects of grain interaction of deformation in polycrystals*, Materials Science and Engineering : A, vol.257, pp.62-76

- [Moller & Ghorbani, 2013] : Moller J., Ghorbani M. (2013) *Functional summary statistics for the Johnson-Mehl model*, Journal of Statistical Computation and Simulation, vol.85, no.5, pp.899-916
- [Monteiro et al., 2008] : Monteiro E., Yvonnet J., He Q. (2008) *Computational homogenization for nonlinear conduction in heterogeneous materials using model reduction*, Computational Materials Science, vol.42(4), pp.704-712
- [Montheillet & Gilormini, 1996] : Montheillet F., Gilormini P. (1996) *Predicting the Mechanical Behavior of Two-Phase Materials with Cellular Automata*, International Journal of Plasticity, vol.12, no.4, pp.561-574
- [Moreau & Berbenni, 2015] : Moreau C., Berbenni S. (2015) *An affine formulation for the self-consistent modeling of elasto-viscoplastic heterogeneous materials based on the translated field method*, International Journal of Plasticity, vol.64, pp.134-150
- [Mori & Tanaka, 1973] : Mori T., Tanaka K. (1973) *Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions*, Acta Metallurgica, vol.21, pp.571-574
- [Morito et al., 2003] : Morito S., Tanaka H., Konishi R., Furuhashi T., Maki T. (2003) *The morphology and crystallography of lath martensite in Fe-C alloys*, Acta Materialia, vol.51, pp.1789-1799
- [Moulinec & Suquet, 1994] : Moulinec H., Suquet P. (1994) *A fast numerical method for computing the linear and nonlinear mechanical properties of composites*, Comptes Rendus de l'Académie des sciences de Paris, Série II. vol.318, pp.1417-1423
- [Moulinec & Suquet, 1998] : Moulinec H., Suquet P. (1998) *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.157, Issues 1-2, pp.69-94
- [Mura, 1987] : Mura T. (1987) *Micromechanics of Defects in Solids*, Second Revised Edition, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, The Netherlands
- [Myers, 1990] : Myers R. (1990) *Classical and modern regression with applications*, The duxbury advanced series in statistics and decision sciences ed., PWS-KENT Publishing company, 2nd edition
- [Nadot et al., 2020] : Nadot Y., Nadot-Martin C., Hao Kan W., Boufadene S., Foley M., Cairney J., Proust G., Ridosz L. (2020) *Predicting the fatigue life of an AlSi10Mg alloy manufactured via laser powder bed fusion by using data from computed tomography*, Additive Manufacturing, vol.32, pp.100899
- [Nait-Ali et al., 2021] : Nait-Ali A., Hemery S., Gueguen M. (2021) *How macrozone size and morphology influence yield in titanium alloys investigated using fast Fourier transform-based crystal plasticity simulations*, International Journal of Solids and Structures, vol.216, pp.1-16
- [Navarro & De Los Rios, 1987] : Navarro A., De Los Rios E. (1987) *An alternative model of the blocking of dislocations at grain boundaries*, Philosophical Magazine A, vol.57, pp.37-42
- [Neron & Ladeveze, 2010] : Neron D., Ladeveze P. (2010) *Proper generalized decomposition for multiscale and multiphysics problems*, Archives of Computational Methods in Engineering, vol.17, pp.351-372

- [Nouy, 2010] : Nouy A. (2010) *A priori model reduction through Proper Generalized Decomposition for solving time-dependent partial differential equations.*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.199(23-24), pp.1603-1626
- [Oelhart, 2000] : Oelhart G. (2000) *A first course in design and analysis of experiments*, W. H. Freeman editor, <https://hdl.handle.net/11299/168002>
- [Phalke, 2022] : Phalke V. (2022) *Prediction of size effects and regularization of adiabatic shear band formation in single and poly-crystals : Gradient crystal plasticity approach*, Université PSL, Mines ParisTech, thèse de doctorat
- [Phuc Tran, 2018] Phuc Tran V. (2018) *Modélisation à plusieurs échelles d'un milieu continu hétérogène aléatoire*, Université Paris-Est, thèse de doctorat
- [Pineau, 2019] : Pineau A. (2019) *Modélisation 3D de structures de grains par une approche automate cellulaire. Application à la compétition de croissance dendritique et à la cristallisation du silicium polycristallin*, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (Mines ParisTech), thèse de doctorat
- [Ponte Castaneda, 1991] : Ponte Castaneda P. (1991) *The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.39, No.1, pp.45-71
- [Ponte Castaneda & Willis, 1995] : Ponte Castaneda P., Willis J. (1995) *The Effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.43, no.12, pp.1919-1951
- [Poundstone, 1985] : Poundstone W. (1985) *The Recursive Universe*, S.I. : Contemporary Editions
- [Pourian et al., 2014] : Pourian M., Pilvin P., Bridier F., Bocher P. (2014) *Heterogenous elastic behavior of HCP titanium polycrystalline aggregates simulated by cellular automaton and finite element*, Computational Materials Sciences, vol.92, pp.468-475
- [Prakash & Lebensohn, 2009] : Prakash A., Lebensohn R. (2009) *Simulation of micromechanical behavior of polycrystals : Finite elements vs. fast Fourier transforms*, Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol.17, No.6, 064010
- [Proudhon et al., 2010] : Proudhon H., Forest S., Ludwig W. (2010) *Large scale finite element simulations of polycrystalline aggregates : applications to X-ray diffraction and imaging for fatigue metal behaviour*, 31st Risø International Symposium on Materials Science, Sep 2010, Roskilde, Denmark. RISO, pp.121-139
- [Proudhon et al., 2016] : Proudhon H., Li J., Reishig P., Guénichault N., Forest S., Ludwig W. (2016) *Coupling diffraction contrast tomography with the Finite Element Method*, Advanced Engineering Materials, vol.18, No.6, pp.903-912
- [Przybyla & McDowell, 2010] : Przybyla C., McDowell D. (2010) *Microstructure-sensitive extreme value probabilities for high cycle fatigue of Ni-base superalloy IN100*, International Journal of Plasticity, vol.26, pp. 372-394
- [Quey et al., 2011] : Quey R., Dawson P., Barbe F. (2011) *Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.200, no.17-20, pp.1729-1745

- [Quey & Renversade, 2017] : Quey R., Renversade L. (2017) *Optimal polyhedral description of 3D polycrystals : method and application to statistical and synchrotron X-ray diffraction data*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol.330, pp.308-333
- [Quey et al., 2018] : Quey R., Villani A., Maurice C. (2018) *Nearly uniform sampling of crystal orientations*, Journal of Applied Crystallography, vol.51, No.4, pp.1162-1173
- [Renversade & Quey, 2023] : Renversade L., Quey R. (2023) *Intra-grain orientation distributions in deformed aluminium : synchrotron X-ray diffraction experiment and crystal-plasticity finite-element simulation*, Acta Materialia, In press
- [Reuss, 1929] : Reuss A. (1929) *Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle*, Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, Band.9, Heft. 1, pp.49-58
- [Roters et al., 2010] : Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto D., Bieler T., Raabe D. (2010) *Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling : Theory, experiments, applications*, Acta Materialia, vol.58, pp.1152-1211
- [Roters et al., 2010b] : Roters F., Eisenlohr P., Bieler T., Raabe D. (2010) *Crystal Plasticity Finite Element Methods in Materials Science and Engineering*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA
- [Saby, 2014] : Saby M. (2014) *Compréhension et modélisation des mécanismes de refermeture de porosité dans les procédés de mise en forme des métaux à chaud*, Ecole des Mines de Paris, thèse de doctorat
- [Sachs, 1928] : Sachs G. (1928) *Zur Ableitung eines Fließ bedingung*, Mitteilungen der deutschen Materialprüfungsanstalten, Z. V. d. I. Bd. 72, S. 734736
- [Sarkar, 2000] : Sarkar P. (2000) *A brief history of Cellular Automata*, ACM Computing Surveys, vol.32, No.1, pp.80-107
- [Sauzay, 2006] : Sauzay M. (2006) *Effet de l'anisotropie élastique cristalline sur la distribution des facteurs de Schmid à la surface des polycristaux*, Comptes Rendus de Mécanique, vol.334, pp.353-361
- [Sauzay, 2007] : Sauzay M. (2007) *Cubic elasticity and stress distribution at the free surface of polycrystal*, Acta Materialia, vol.55, pp.1193-1202
- [Segurado et al., 2002] : Segurado J., Llorca J., Gonzalez C. (2002) *On the accuracy of mean-field approaches to simulate the plastic deformation of composites*, Scripta Materialia, vol. 46, pp.525-529
- [Shibata & Ono, 1978] : Shibata M., Ono K. (1978) *Stress Concentration due to an Oblate Spheroidal Inclusion*, Material Science and Engineering, vol.34, pp.131-137
- [Silva et al., 2019] : Silva A., Silva A., Gouvea M. Jr (2019) *A novel model to simulate cloud dynamics with cellular automaton*, Environmental Modelling and Software, vol.122, pp. 104537
- [Simmons & Wang, 1971] : Simmons G. & Wang H. (1971) *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties : a handbook* (2nd edition), Cambridge, Mass., M.I.T. Press : The M.I.T. Press

- [Simonovski et al., 2006] Simonovski I., Nilsson K.-F., Cizelj L. (2006) *Crack tip displacements of microstructurally small cracks in 316L steel and their dependance on crystallographic orientations of grains*, Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, vol.30, pp.463-478
- [Simonovski & Cizelj, 2009] : Simonovski I., Cizelj L. (2009) *Small cracks in a simulated columnar polycrystalline aggregate with random 2D and 3D lattice orientations*, Engineering against Fracture : Proceedings of the 1st conference
- [Sinning, 2004] : Sinning H.-R. (2004) *The intercrystalline Gorsky effect*, Material Science and Engineering : A, vol.370, pp.109-113
- [Sirovich, 1987] : Sirovich (1987) *Turbulence and the dynamics of coherent structures, Part I : Coherent Structures*, American Mathematical Society, Quarterly of Applied Mathematics, vol.45(3), pp.561-571
- [Slimi et al., 2008] : Slimi R., El Yacoubi S., Dumonteil E., Gourbière S. (2008) *A cellular automata model for Chagas disease*, Applied Mathematical Modelling, vol.33, pp.1072-1085
- [Taylor, 1938] : Taylor G.I. (1938) *Plastic Strain in Metals*, Journal of Institut of Metals, pp. 62-307
- [Thorel et al., 1996] : Thorel L., Pouya A., Ghoreychi M. (1996) *Modélisation micro-macro autocohérente du comportement du sel gemme : comparaison avec l'expérience de laboratoire*, 3^{eme} Colloque du Groupe Français de Rhéologie, Oct. 1996, Metz, France
- [Tressou et al., 2018] : Tressou B., Vaziri R., Nadot-Martin C. (2018) *Application of the incremental variational approach (EIV model) to the linear viscoelastic homogenization of different types of microstructures : long fiber-, particle-reinforced and strand-based composites*, European Journal of Mechanics - /A Solids, vol.68, pp.104-116
- [Tressou et al., 2023] : Tressou B., Gueguen M., Nadot-Martin C. (2023) *Application of the variational EIV approach to linear viscoelastic phases governed by several internal variables - Examples with the generalized Maxwell law*, European Journal of Mechanics - /A Solids, vol.97, pp.104778
- [Tsekpuia et al., 2023] : Tsekpuia E., Guery A., Gey N., Berbenni S. (2023) *A microstructure-based three-scale homogenization model for predicting the elasto-viscoplastic behavior of duplex stainless steels*, International Journal of Plasticity, vol.164, pp.103575
- [Vincent et al., 2014] : Vincent M., Nadot-Martin C., Nadot Y., Dragon A. (2014) *Fatigue from defect under multiaxial loading : Defect Stress Gradient (DSG) approach using ellipsoidal Equivalent Inclusion Method*, International Journal of Fatigue, vol.59, pp.176-187
- [Voigt, 1889a] : Voigt W. (1889) *Bestimmung der Elasticitäts-Constanten für Kalkspath*, Nachrichten von der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften und der Georg-Augusts-Universität, No.1-21, Göttingen, Dieterichsche Verlags-Buchhandlung, pp.483-512
- [Voigt, 1889b] : Voigt W. (1889) *Einige Bemerkungen über die Gleitflächen des Kalkspaths*, Nachrichten von der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften und der Georg-Augusts-Universität, No.1-21, Göttingen, Dieterichsche Verlags-Buchhandlung, pp.512-519

- [Voigt & Drude, 1889] : Voigt W., Drude P. (1889) *Bestimmung der Elasticitätsconstanten einiger dichter Mineralien*, Nachrichten von der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften und der Georg-Augusts-Universität, No.1-21, Göttingen, Dieterichsche Verlags-Buchhandlung, pp.519-561
- [von Neumann, 1951] : von Neumann J. (1951) *The general and logical theory of automata*, In L.A. Jeffress (Ed.), Cerebral Mechanisms in behavior ; the Hixon Symposium, pp.1-41
- [von Neumann, 1966] : von Neumann J. (1966) *Theory of self-reproducing automata*, ed. A. W. Burks, Univ. of Illinois Press
- [Voronoi, 1908a] : Voronoi G. (1908) *Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques - Premier Mémoire : Sur quelques propriétés des formes quadratiques positives parfaites*, Journal für die reine und angewandte Mathematik, pp.97-178
- [Voronoi, 1908b] : Voronoi G. (1908) *Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques - Deuxième Mémoire : Recherches sur les paralléloèdres primitifs*, Journal für die reine und angewandte Mathematik, Bd.134, Heft 4, pp.198-287
- [Wang et al., 1991] Wang S., Miller K., Brown M., De Los Rios E. (1991) *A statistical analysis of short fatigue crack growth*, Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, vol.14, N.2/3, pp.351-368
- [Willis, 1977] : Willis J. (1977) *Bounds and self-consistent estimates for the overall properties of anisotropic composites*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol.25, pp.185-202
- [Yang et al., 2019] : Yang S., Dirrenberger J., Monteiro E., Ranc N. (2019) *Representative volume element size determination for viscoplastic properties in polycrystalline materials*, International Journal of Solids and Structures, vol.158, pp.210-219
- [Yaguchi & Busso, 2004] : Yaguchi M., Busso E. (2004) *On the accuracy of self-consistent elasticity formulations for directionally solidified polycrystal aggregates*, International Journal of Solids and Structures, vol.42, pp.1073-1089
- [Yvonnet, 2012] : Yvonnet J. (2012) *A fast method for solving microstructural problems defined by digital images : a space Lippman-Schwinger scheme*, International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol.92, pp.178-205
- [Zhang et al., 2007] : Zhang. J.-M., Zhang Y., Xu K.-W., Ji V. (2007) *Young's modulus surface and Poisson's ratio curve for cubic metals*, Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol.68, pp.503-510
- [Zhang & Wang, 2014] : Zhang H., Wang X. (2014) *Estimation of effective permeability for magnetoactive composites containing multi-chain structured particles based on the generalized Mori-Tanaka approach*, Smart Materials and Structures, vol.23, pp.045009

Résumé

L'objectif de cette thèse, menée en cotutelle entre l'ISAE-ENSMA / Institut Pprime et l'Ecole de Technologie Supérieure (ETS) de Montréal / LOPFA, était de développer un outil capable de générer un agrégat polycristallin et d'y calculer les champs élastiques locaux en prenant en compte les effets du voisinage de chaque grain. Cet outil a été pensé pour une utilisation statistique afin d'identifier les configurations de voisinage les plus néfastes ainsi que l'influence de la morphologie, de l'anisotropie élastique du matériau et du type de chargement sur ces configurations. S'il existe des modèles capables de calculer les champs mécaniques, ces derniers tendent à minorer les effets de voisinage, et lorsque ces effets sont pris en compte, le coût de calcul est souvent prohibitif.

L'outil proposé prolonge les travaux antérieurs de [Bretin et *al.*, 2019] fondés sur l'utilisation des Automates Cellulaires (AC). Tout d'abord, les simulations en champs complets, auparavant nécessaires à l'AC pour calculer l'effet individuel de chaque voisin sur un grain, ont été remplacées par des calculs analytiques *via* la Méthode de l'Inclusion Equivalente (EIM) [Eshelby, 1957; Eshelby, 1959; Eshelby, 1961]. Un code EIM unifié permettant de traiter une inhomogénéité élastique, isotrope ou anisotrope (*via* l'assignation d'une orientation cristallographique (OC)), spatialement orientée dans un milieu isotrope sous chargement uniforme à l'infini, a été spécifiquement développé. Ce code a été validé à chaque nouvelle fonctionnalité introduite en confrontant les champs à l'intérieur et à l'extérieur de l'inhomogénéité selon différents chemins depuis l'interface, à des solutions de référence Elements Finis (EF). Cette validation systématique pour les points intérieurs et extérieurs garantit la fiabilité du programme final et constitue en soi une contribution originale de la thèse. Le code EIM a ensuite été introduit dans l'AC. Dans un second temps, le modèle de Bretin et l'AC sous-jacent, initialement conçus pour des agrégats réguliers (type Kelvin), ont été enrichis pour pouvoir traiter des agrégats morphologiquement plus réalistes. Un module de génération (Voronoi, Laguerre, Johnson-Mehl) a été introduit à cet effet, ainsi qu'un module pour identifier le voisinage irrégulier de chaque grain et enfin, un module d'approximation des grains par des sphéroïdes inertiuellement équivalents. Les résultats du modèle étendu ont été confrontés à des calculs en champs complets par EF pour apprécier leur précision et le gain en temps de calcul est de plusieurs ordres de grandeur inférieur.

Dans une dernière partie, le code EIM a été exploité pour étudier l'influence des caractéristiques (forme, rapport de forme, nature, orientations spatiale et cristallographique) sur les contraintes internes et externes à une inhomogénéité isolée dans un milieu infini isotrope. Une deuxième étude, statistique cette fois, a été menée avec des agrégats de 316L puis de Titane, chargés en déformation uniaxiale et en glissement simple. Le rôle de l'anisotropie élastique et de l'orientation cristallographique des voisins est clairement mis en évidence. Des travaux ont été entamés pour insérer une nouvelle phase minoritaire au sein d'un agrégat existant - ici des carbures "apparaissant" dans une microstructure jusque-là chimiquement homogène. Leur effet est important mais localisé.

Mots-clefs : Théorie d'Eshelby (EIM), Automate Cellulaire, Effet de voisinage, Polycristaux, Elements Finis

Abstract

The aim of this PhD thesis, conducted in co-supervision between ISAE-ENSMA / Pprime Institute and the Ecole de Technologie Supérieure (ETS) of Montreal / LOPFA was to develop a tool for the generation of polycrystalline aggregates and the calculation of elastic fields by taking into account the neighborhood effects of each grain. This tool was designed for a statistic employment in order to identify the most harmful neighborhood configurations as well as the influence of the morphology, the elastic anisotropy of the material and of the type of loading on these configurations. Although some existing models allow to estimate local fields, they tend to underestimate the neighborhood effect and when this effect is taken into account, the computational cost is often prohibitive.

The advanced tool is an extension of the previous work by [Bretin et al., 2019] based on Cellular Automata (CA). The full-field simulations previously used to compute each neighbor individual effect on a grain were first replaced by analytical calculations with the Equivalent Inclusion Method (EIM) [Eshelby, 1957; Eshelby, 1959; Eshelby, 1961]. A unified EIM code able to deal with an elastic inhomogeneity, isotropic or anisotropic (*via* the assignation of a crystallographic orientation (CO)), spatially oriented in an isotropic medium under uniform loading at infinity, was developed to this aim. Each new functionality introduced in the code was carefully validated by comparisons to Finite Element (FE) reference solutions, both inside and outside the inhomogeneity along different paths from the interface. Such a systematic evaluation, for internal and external points, allows to be confident in the reliability of the final program and constitutes an original contribution of the present work. The EIM code was then introduced in the CA. At second, the Bretin's model and underlying CA, originally devoted to regular aggregates (Kelvin type) were extended in order to deal with more realistic aggregates. A module for the aggregates generation (Voronoi, Laguerre, Johnson-Mehl) was incorporated to this aim as well as a module for the identification of the irregular neighborhood of each grain and at last, a module to approximate the grains by equivalent inertia spheroids. The results of the extended model were compared to FE full-field calculations in order to appreciate the accuracy and the calculation time several orders of magnitude lower.

In a second part, the EIM code was exploited in order to analyse the influence of various characteristics (shape, aspect ratio, nature, spatial and eventual crystallographic orientations) of an isolated inhomogeneity on the inside and outside stress field. A second study, this time statistical, was then carried out with 316L and Titanium aggregates under uniaxial strain loading and shear-strain loading. The role of the elastic anisotropy and of the crystallographic orientation of neighbors was clearly demonstrated. Finally, additional work was undertaken in order to insert a new minority phase into an existing aggregate, here carbides "appearing" in a microstructure previously chemically homogeneous. The effect of these carbides is significant but localized.

Keywords : Eshelby Theory (EIM), Cellular Automaton, Neighborhood Effect, Polycrystals, Finite Elements

