



HAL
open science

Modélisation par la méthode des champs de phase du maillage mécanique dans des alliages de titane

β -métastables

Juba Hamma

► **To cite this version:**

Juba Hamma. Modélisation par la méthode des champs de phase du maillage mécanique dans des alliages de titane β -métastables. Sciences de l'ingénieur [physics]. SORBONNE UNIVERSITE, 2020. Français. NNT: . tel-03105727v1

HAL Id: tel-03105727

<https://hal.science/tel-03105727v1>

Submitted on 11 Jan 2021 (v1), last revised 30 Nov 2021 (v2)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE DE DOCTORAT

Pour l'obtention du grade de

Docteur de Sorbonne Université

École doctorale 397 – Physique et chimie des matériaux



Modélisation par la méthode des champs de phase du maillage mécanique dans des alliages de titane β -métastables

Juba HAMMA

Directeur de thèse : **Alphonse FINEL**

Co-encadrants de thèse : **Benoît APPOLAIRE, Yann LE BOUAR**



Thèse soutenue le 14 Septembre 2020 devant un jury composé de :

Hélène ZAPOLSKY	Professeure des Universités, GPM, Rouen	Rapportrice
Philippe CASTANY	Maître de Conférences, ISCR, Rennes	Rapporteur
Christophe DENOVAL	Ingénieur de Recherche, CEA/DAM, Arpajon	Examinateur
Lola LILENSTEN	Chargée de Recherche, IRCP, Paris	Examinatrice
Nadine WITKOWSKI	Professeure des Universités, INSP, Paris	Examinatrice
Benoît APPOLAIRE	Professeur des Universités, IJL, Nancy	Co-encadrant de thèse
Yann LE BOUAR	Directeur de Recherche, LEM, Châtillon	Co-encadrant de thèse
Alphonse FINEL	Directeur de Recherche, LEM, Châtillon	Directeur de thèse

À mon père, ma mère et mon frère,

REMERCIEMENTS

Le moment est venu de remercier l'ensemble des personnes qui m'ont permis de faire de ma thèse une période mémorable et très enrichissante, tant du point de vue personnel que professionnel. J'insiste sur le fait que les quelques lignes qui vont suivre ne sont qu'une infime partie de ce que je cherche à exprimer ici.

Je souhaite commencer par remercier les membres du jury, les rapporteurs Hélène Zapolsky et Philippe Castany, ainsi que les examinateurs Lola Lilensten, Christophe Denoual et Nadine Witkowski. Merci d'avoir accepté de faire partie de ce jury et pour l'intérêt que vous avez porté à mes travaux. Aussi, merci d'avoir pu être présents à la soutenance en cette période compliquée, cela a été un soulagement pour moi, qui n'a pas eu à gérer une soutenance en visioconférence pouvant vite devenir compliquée.

J'aimerais ensuite remercier les partenaires du projet ANR TITWIP, Samuel Forest, Frédéric Prima, Lu Tuan Le, ainsi que Yolaine Danard, proche du projet, avec qui j'ai pu avoir des discussions très intéressantes, et qui ont su se rendre disponibles lorsque j'étais à la recherche d'informations spécifiques du côté matériau.

Je passe maintenant au trio de choc, mes encadrants de thèse. Je souhaite tout d'abord les remercier de m'avoir accordé leur confiance sur ce sujet. Alphonse, merci de m'avoir transmis une partie de tes connaissances, ta rigueur et ta passion de la physique. Après un cursus en génie civil, j'avoue que je ne m'attendais pas à discuter de théories de réduction de Lagrange quelques années plus tard, enfermés dans ton bureau où l'on ne se rend compte du temps qui passe que par le biais du rappel "boulangerie". Tu as toujours pu m'accorder du temps lorsque j'en avais besoin, ce qui a été une réelle chance pour moi. Yann, je te remercie pour ta pédagogie et pour le temps que tu m'as accordé à m'expliquer de nombreux concepts physiques, ta capacité à les simplifier pour me les expliquer m'a beaucoup appris. Je te remercie surtout pour ces nombreuses discussions en fin de journée où mes discours n'étaient pas cohérents, où tu as su être patient et me re-motiver dans les moments compliqués. Benoît, pas besoin

de spécifier d'initiale pour te reconnaître, mon compagnon vénitien, plus que disponible malgré l'éloignement, tu as su me guider sur la voie de la recherche scientifique et des nouvelles normes Fortran au tout début de ma thèse. Entre autres, tes connaissances bibliographiques et ta veille technologique m'ont plus qu'impressionné. Tu as su m'apprendre à être concis (et pas cir-) et à toujours chercher la petite bête. Associé à cela, une personne à qui on peut tout dire, toujours à l'écoute et prêt à dégainer ses meilleurs conseils. Petit clin d'œil à l'un de tes sujets de recherche principal pendant mon séjour au LEM, me concernant, et qui n'a hélas pas abouti (en rapport avec l'Ukraine, à un moment ...).

J'en viens au LEM. Un labo avec une ambiance telle que sa cafétéria est devenue une extension de mon bureau. Merci à tous les moments que j'ai pu vivre avec vous. Je veux commencer par dire merci à Jean-Seb pour tous les coups de main qu'il a pu me filer et pour tout ce qu'il a pu m'apprendre (tant du point de vue technique que culturel, clin d'œil aux pires jobs de l'humanité). J'enchaîne avec Fred, grand maître Photoshop, merci de m'avoir initié à la microscopie et à D&Co, et de m'avoir montré les premières images de colonnes d'atomes de ma vie. Désolé pour le shutter. Amandine, MC Madéphine, merci pour la bonne humeur (of course) que t'apportes au labo, maître-psychologue bénévole spécialisée en vie de doctorant, toujours à l'affût de la bonne vanne. Mathieu, grand chef actuel du LEM, merci pour ta bonne humeur et ta présence sans laquelle mes cafés du matin (et du soir) auraient été moins sympas. Riccardo et Hakim, merci d'avoir apporté un peu de foot dans ces discussions café. Georges, Ladislav et François, merci pour ces cafés chargés d'histoire. Armelle, merci pour l'historique du labo, et pour tes innombrables histoires qui savent si bien occuper une discussion. Une mention spéciale à mes co-bureaux Antoine, Hocine, Benoît Da. (eh oui, les initiales ne sont plus suffisantes ...), Laure (pour deux jours, mais ça compte) et enfin Henri, avec qui j'ai pu avoir des discussions intéressantes, des bons moments d'entraide et de rigolade. Viviane, Clémence, Fadoua, Guillaume, Catherine, merci car sans vous tous mes problèmes administratifs n'auraient pas été aussi facilement résolus.

Je passe maintenant à tous les stagiaires, doctorants, ex-doctorants, post-docs et ex-postdocs que j'ai pu côtoyer (et plus) à l'ONERA. Merci de me pardonner si j'oublie d'en citer certains. Je voulais commencer par remercier Pierrot, copain de fac et finalement de rédaction, Anis dit l'aigle de Djerba, Edi le cuistot, Tibop le mexicain accueillant, Matthieu D. l'ex-cheminée, Hocine, Alice, Gader, Carolina pour tous ces cafés (et +) partagés, François P. et ses merveilleuses histoires, avec qui j'ai pu passer de super moments au tout début de ma thèse, et qui m'ont permis de m'intégrer dans la vie sociale de l'ONERA. Pour toutes les galères partagées, je tiens à remercier particulièrement les thésards de la "même" génération, Alex, Henri, Cora et Maoyuan. Aussi, pour tous les moments partagés, je veux remercier Lorenzo, Étienne G., Léonard, Francesca, Daniel, Enrica, Fabrizio, Laurent, Laure, Thomas B., Sébastien, Louise S., Antoine LGG, Camille, Gwen, Julie, Florence, Laurence, Océane, Christinée, Étienne R., Thomas V., Chengjie, Baptiste, ... Je m'excuse encore si j'en oublie. Enfin, un remerciement spécial à la Ladis Prod, Luis La Machine et MC Carré, C'est carré, pour m'avoir permis de passer de supers moments pendant la période de rédaction.

J'en viens à mes proches, qui ont su me soutenir et me sortir (que je le veuille ou non) du milieu de la recherche. Je remercie pour cela Lyes le couz, Sabine, Nassim le popote, Mamad et Hakim, Aris,

Syph, Anis, Massil, Bao, Louisa, Sarah, Rayan, Aurèle, Alex, Rami et bien d'autres ...

Je voulais finir par remercier ceux sans qui, je pense, tout cela n'aurait pas été possible : mes parents et mon frère. Merci à vous de m'avoir supporté au quotidien et de m'avoir apporté votre soutien continu.



TABLE DES MATIÈRES

Remerciements	v
Introduction générale	1
1 État de l'art	5
1.1 Généralités sur le titane et ses alliages	6
1.1.1 Le titane pur	6
1.1.2 Les alliages de titane	7
1.1.3 Utilisation des alliages de titane β -métastables	9
1.2 Mécanismes à l'origine du comportement mécanique des alliages de titane TRIP/TWIP	10
1.2.1 Glissement cristallographique	11
1.2.2 Transformations de phase sous contrainte	12
1.2.3 Maclage mécanique	16
1.3 Modélisation microstructurale du maclage mécanique	23
1.3.1 Description cinématique du maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$	24
1.3.2 Modélisation champ de phase du maclage mécanique	26
1.3.3 Paramètres d'ordre primaires et secondaires	31
2 Modèle champ de phase de croissance de macles mécaniques dans le cadre géométriquement linéaire	35
2.1 Formalisme champ de phase	36
2.1.1 Profil d'un champ de phase à l'équilibre	38
2.1.2 Énergie d'interface	39
2.1.3 Loi d'évolution : modèle champ de phase de type Allen-Cahn	40
2.2 Modèle champ de phase de type Allen-Cahn couplé à l'élasticité : cadre géométriquement linéaire	42

2.2.1	Résolution numérique de la loi d'évolution du champ de phase	44
2.2.2	Adimensionnement du problème	45
2.3	Implémentation numérique et résultats préliminaires	46
2.3.1	Sans prise en compte de l'énergie élastique	47
2.3.2	Avec prise en compte de l'énergie élastique	49
2.3.3	Stabilité du profil en tangente hyperbolique	52
2.4	Étude de la croissance d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$	58
2.4.1	Cas de l'énergie d'interface isotrope	58
2.4.2	Cas de l'énergie d'interface anisotrope	66
2.4.3	Cas de l'énergie d'interface anisotrope et largeur d'interface constante	69
2.4.4	Rôle de l'anisotropie de l'énergie élastique	75
2.5	Conclusion	79
3	Solveur mécanique par méthode spectrale dans le cadre géométriquement non-linéaire	83
3.1	Modèle élastique en grande déformation	84
3.1.1	Équilibre mécanique	86
3.2	Équilibre mécanique par méthode de point fixe	87
3.2.1	Choix du critère d'arrêt de l'algorithme itératif	91
3.2.2	Choix du milieu de référence homogène	92
3.2.3	Résumé de l'algorithme de résolution de l'équilibre mécanique par méthode spectrale	94
3.3	Validation de la résolution de l'équilibre mécanique	95
3.3.1	Laminé de St-Venant-Kirchhoff	95
3.3.2	Problème d'Eshelby : précipité sphérique dans un milieu fini sphérique	106
3.4	Conclusion	112
4	Modèle champ de phase de croissance de macles mécaniques dans le cadre géométriquement non-linéaire	113
4.1	Modèle champ de phase de type Allen-Cahn couplé à l'élasticité : cadre géométriquement non-linéaire	114
4.2	Comparaison des microstructures obtenues dans le CGL et le CGNL : modèle mono-variant	116
4.2.1	Conditions initiales	116
4.2.2	Paramètres d'entrée des modèles champ de phase avec élasticité	118
4.2.3	Conditions aux limites	118
4.2.4	Résultats et analyse	119
4.3	Développement d'un modèle champ de phase multi-variants	130
4.3.1	Mise en place du modèle multi-variants	130
4.3.2	Chargement appliqué pour la croissance de deux variants de macle	131
4.3.3	Effet des conditions limites périodiques sur les morphologies obtenues	138
4.4	Génération de germes de variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ autour d'un défaut	145
4.5	Conclusion	152

5 Ouverture sur la modélisation de systèmes de maclage hiérarchiques	157
5.1 Analogie entre hiérarchie de systèmes de maclage et transformation martensitique reconstructive	158
5.1.1 Différences entre transformation martensitique “ <i>weak</i> ” et reconstructive	158
5.1.2 Analogie avec hiérarchie des systèmes de maclage	160
5.2 Modélisation des transformations de phase reconstructives	160
5.3 Application au système de maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$	164
5.3.1 Validité de la loi de Cauchy-Born	164
5.3.2 Algorithme de réduction des métriques en 3D	165
5.4 Étude d’un problème simplifié en 1D	166
5.4.1 Présentation du modèle	166
5.4.2 Résolution de l’équilibre mécanique	168
5.4.3 Résultats préliminaires	170
5.4.4 Conclusion	171
 Conclusion générale & Perspectives	 173
 A Notations utilisées	 177
 B Données concernant les variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$	 179
B.1 Éléments cristallographiques	179
B.2 Matrices de transformation miroir	179
B.3 Tenseurs de déformation libre	180
 C Résolution de l’équilibre mécanique dans le cadre géométriquement linéaire par méthode spectrale	 181
 D Calcul de la force motrice élastique dans le cadre géométriquement non-linéaire	 185
 Bibliographie	 187

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Ces dix dernières années ont vu l'essor d'une nouvelle famille d'alliages de titane aux propriétés à froid très prometteuses, allant à l'encontre de l'habituel compromis résistance/ductilité. En effet, ils présentent à la fois une excellente résistance maximale (~ 800 MPa) et une ductilité tout à fait remarquable pour des alliages de titane ($\sim 40\%$). Ces propriétés ramenées à la masse des alliages sont donc exceptionnelles et permettent d'envisager de nouvelles applications dans le domaine aéronautique. Cette combinaison de propriétés souvent opposées est obtenue en mobilisant deux types de transformations que subit, sous contrainte, la phase cubique centrée du titane (β) stabilisée par des éléments d'alliage comme le molybdène : d'une part, une transformation martensitique $\beta \rightarrow \alpha''$; d'autre part, un maillage de type $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$, mode inhabituel dans les métaux cubiques centrés. Ces deux transformations contribuent à la ductilité et à l'écroûissage de ces alliages qualifiés pour cette raison de TRIP/TWIP pour respectivement *Transformation* et *Twinning Induced Plasticity*. Sans surprise, la microstructure combinant ces produits de transformation se révèle très complexe : elle est constituée d'un réseau de macles qui s'entrecroisent à l'échelle des grains. Au sein de chacune des macles, des macles secondaires et la martensite α'' côtoient une morphologie particulière de la phase ω dans une sorte d'imbrication récursive qui s'accroît à mesure qu'on déforme le matériau.

Ces alliages font évidemment l'objet d'intenses recherches à la fois pour leur potentiel d'applications, et pour les questions qu'ils soulèvent. Aussi, de nombreuses études de caractérisation sont menées depuis dix ans, combinant d'une part des techniques post-mortem pour identifier les différents produits de transformation et leur agencement dans la microstructure, et d'autre part des techniques in-situ pour comprendre le processus dynamique. Malheureusement, la séquence des transformations reste incertaine et fait toujours l'objet d'un débat nourri dans la littérature, même si de nombreux éléments sont maintenant mieux compris.

Curieusement, on peut noter l'absence d'études de modélisation consacrées à la formation de cette microstructure, dont la raison en est probablement l'extrême complexité. Il n'en demeure pas moins que le développement de modèles capables de prédire l'évolution des microstructures permettrait d'apporter des réponses aux questions en suspens, validant ou invalidant les différents scénarios proposés

jusqu'à maintenant sur la base des observations expérimentales. Il semblait cependant périlleux de vouloir d'emblée embrasser toutes les transformations évoquées, et plus raisonnable de se concentrer sur la principale transformation sous contrainte dans ces alliages, à savoir le maclage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$. Par ailleurs, la méthode dite de champ de phase est apparue comme la plus adaptée pour s'intéresser à la formation du réseau de macles, et la plus versatile pour intégrer dans un futur proche les autres transformations dans un même formalisme.

Ainsi, le présent travail a pour objectif le développement d'un modèle de champ de phase du maclage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$ capable de simuler la croissance de macles primaires. Le manuscrit est structuré en suivant la démarche progressive de notre travail.

Tout d'abord, une étude bibliographique est proposée dans le **Chapitre 1**. Après quelques généralités sur les alliages de titane, dont les alliages de titane β -métastables auxquels appartiennent les alliages TRIP/TWIP, nous présentons en détail les différentes transformations sous contrainte, et plus particulièrement le maclage mécanique $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$, objet de notre étude. La fin du chapitre présente un aperçu de différents modèles champ de phase consacrés au maclage mécanique dans la littérature.

Nous présentons ensuite dans le **Chapitre 2**, après quelques rappels sur l'approche par champ de phase, le développement d'un modèle permettant de simuler la croissance anisotrope de macles $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$. Pour cela, on a tout d'abord choisi d'adapter le modèle champ de phase de maclage mécanique mis en place par Heo *et al.* [2011] au système de maclage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$. Ce modèle est de type Allen-Cahn (Allen *et Cahn* [1979]) et intègre une contribution élastique exprimée dans le formalisme géométriquement linéaire. Nous procédons à une analyse classique mais approfondie du modèle de Heo *et al.* [2011] pour en montrer les limites en terme de force motrice élastique et d'intensité de l'anisotropie d'énergie d'interface. Puis, nous examinons les formes générées par les deux sources d'anisotropie. Dans le cas de l'anisotropie d'énergie d'interface, nous proposons une amélioration du modèle pour que l'épaisseur de l'interface reste indépendante de son orientation. Nous étudions enfin le cas de l'anisotropie de l'énergie élastique associée au maclage et mettons en place une analyse permettant de faire le lien avec les descriptions géométriques usuelles.

Dans le **Chapitre 3**, on remet en question le bien fondé d'utiliser l'élasticité en géométrie linéaire dans la mesure où les cisaillements accompagnant le maclage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$ sont de l'ordre de 35%. On développe donc un solveur spectral de l'équilibre mécanique statique. Dans la mesure où ce type de solveurs est beaucoup moins courant en géométrie non-linéaire qu'en géométrie linéaire, nous présentons en détail l'algorithme et discutons l'optimisation de ses paramètres sur des cas de validation.

Dans le **Chapitre 4**, le modèle champ de phase développé en fin de **Chapitre 2** est ré-écrit dans le formalisme géométriquement non-linéaire. On met ensuite en évidence les différences de microstructures prédites par les deux formalismes. Pour simuler les réseaux de macles observés expérimentalement, nous proposons un modèle multi-variants implémenté dans les deux formalismes, linéaire et non-linéaire. Nous comparons à nouveau les prédictions avec ces formalismes en analysant plus par-

ticulièrement l'influence des conditions aux limites périodiques imposées par les méthodes spectrales. Nous examinons les capacités du modèle à faire germer des variants dans le voisinage d'un défaut et nous étudions comment les variants sont sélectionnés dans une telle configuration. Nous terminons en discutant les limitations du modèles et proposons quelques pistes d'amélioration.

Dans le **Chapitre 5**, nous présentons les prémises d'un modèle qui permettrait d'incorporer, de manière très générale, la génération récursive de macles d'ordres supérieurs aux macles primaires. Ce modèle repose sur le repliement d'un potentiel élastique périodique sur son domaine fondamental, par le biais d'un algorithme de réduction de Lagrange (ou Seeber), et l'introduction d'une variable gardant la mémoire du changement de référence par rapport à laquelle l'équilibre élastique est résolu. Nous illustrons cette méthodologie par l'application d'un « *toy model* » dans une configuration 1D.

Enfin, nous résumons dans la conclusion générale les points essentiels apportés par notre travail et les perspectives qu'ils ouvrent.

Les travaux de cette thèse ont été réalisés au sein du Laboratoire d'Étude des Microstructures (LEM, ONERA-CNRS) dans le cadre du projet ANR TITWIP, en partenariat avec l'Institut de Recherche de Chimie Paris (IRCP, Chimie ParisTech) et le Centre des Matériaux (CdM, MINES ParisTech).

CHAPITRE

1

ÉTAT DE L'ART

Ce chapitre présente d'une part le type de matériau étudié dans cette thèse, et d'autre part les différents modèles champ de phase de maillage mécanique proposés dans la littérature. La [Section 1.1](#) introduit le titane et ses alliages et permet de définir les alliages dits TRIP/TWIP concernés par notre étude. Dans la [Section 1.2](#), nous recensons les mécanismes proposés dans la littérature pour expliquer le comportement singulier des alliages TRIP/TWIP. Nous nous attardons plus particulièrement sur le mode de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Enfin, la [Section 1.3](#) présente certains modèles champ de phase de maillage mécanique retrouvés dans la littérature qui ont joué un rôle sur le choix des hypothèses de départ concernant les modèles développés dans les Chapitres 2 et 4.

1.1 Généralités sur le titane et ses alliages

1.1.1 Le titane pur

Le titane pur est un métal de transition du groupe 4 qui présente une structure cristallographique hexagonale compacte (h.c.) à température et pression ambiante, appelée phase α . Cette phase est stable jusqu'à 882°C , où le titane subit une transformation allotropique ([McQuillan \[1963\]](#)). Le résultat de cette transformation est une phase de structure cristallographique cubique centrée (c.c.), appelée β . La température $T_\beta = 882^\circ\text{C}$ est appelée température de transus β .

En restant à température ambiante, tout en appliquant une pression de l'ordre d'une dizaine de GPa, on observe la transformation de la phase α en phase ω , dont la structure cristallographique est constituée d'un réseau de Bravais hexagonal et de trois atomes par maille primitive ([Jamieson \[1963\]](#), [Jayaraman et al. \[1963\]](#), [Sikka et al. \[1982\]](#)). On peut conserver cette phase ω , dans un état métastable, en revenant à pression atmosphérique. Mais un recuit ou un laminage à froid conduit à un retour à la phase α la plus stable dans ces conditions ([Jamieson \[1963\]](#), [Vohra et Spencer \[2001\]](#)). Ces différentes structures cristallines du titane sont présentées sur la [figure 1.1](#).

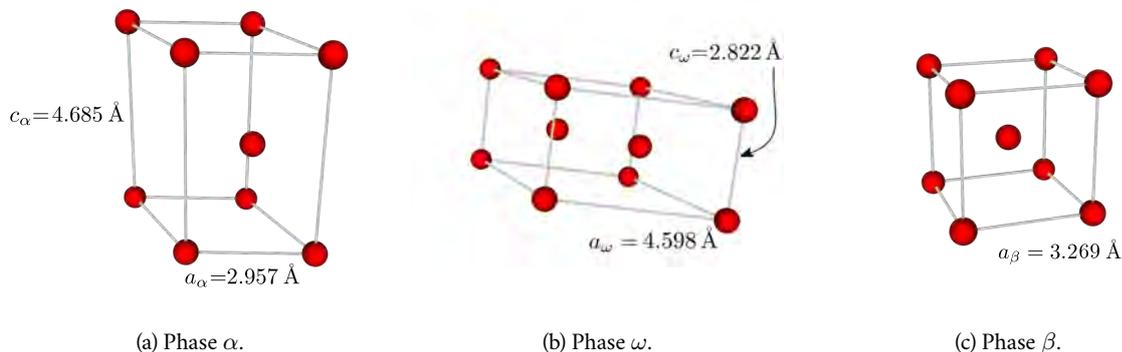


FIGURE 1.1 – Structures cristallines des phases allotropiques du titane. Les paramètres de maille sont issus de (a-b) [Vohra et Spencer \[2001\]](#) à température ambiante et à 10^5Pa , (c) de [Senkov et al. \[2001\]](#) où la valeur à température ambiante est extrapolée du paramètre de maille mesuré entre 900°C et 1050°C .

1.1.2 Les alliages de titane

L'ajout d'éléments d'alliage au titane permet de modifier la stabilité des différentes phases répertoriées dans le titane pur. Les éléments d'addition peuvent être classés en 3 catégories majeures en fonction de leurs effets sur la température de transus T_β (Lütjering et Williams [2007], Veiga *et al.* [2012]) : neutres, α -gènes ou β -gènes.

Les éléments neutres (Sn, Zr, ...) affectent légèrement la valeur du transus T_β . Leur effet est ainsi négligeable du point de vue de la stabilité de la phase β à haute température, mais peut influencer sa stabilité à basse température sous sollicitation mécanique.

Les éléments α -gènes (Al, O, N, B, C, ...) stabilisent la phase α du titane en élevant la température de transus T_β . À noter que les éléments O, N, B et C s'insèrent dans les sites interstitiels des mailles, tandis que l'aluminium forme une solution solide de substitution avec le titane (Lütjering et Williams [2007]).

Les éléments β -gènes stabilisent quant à eux la phase β du titane en abaissant la valeur du transus T_β . Les travaux de revue de Kolli *et al.* [2015] et Kolli et Devaraj [2018] sur la stabilité en température de la phase β dans les alliages de titane montrent que l'on distingue les éléments isomorphes (Mo, V, Nb, Ta, ...) des éléments eutectoïdes (Cr, Fe, Mn, Ni, Cu, Au, ...).

Outre leur incidence sur les phases d'équilibre α et β , les éléments d'alliage modifient les températures d'apparition des phases métastables à pression atmosphérique, issues le plus souvent de transformations displacives de la phase β . D'une manière générale, un enrichissement en élément β -gène conduit à diminuer les températures de début de ces transformations.

Les alliages obtenus sont ensuite classés en fonction des phases stables en présence. La stabilité des phases étant liée aux types d'élément d'addition (α -gène, β -gène ou neutre), il existe une corrélation entre types d'élément en présence dans l'alliage et classe d'alliage. Afin de prendre en compte les différents éléments d'alliage et d'en tirer un indicateur sur la stabilité des phases en présence, Bania [1994] propose un paramètre empirique nommé molybdène équivalent, noté MoE :

$$\begin{aligned} \text{MoE} = & 1 \text{ Mo} + 0,67 \text{ V} + 0,44 \text{ W} + 0,28 \text{ Nb} + \\ & 0,22 \text{ Ta} + 2,9 \text{ Fe} + 1,6 \text{ Cr} + 0,77 \text{ Cu} + \\ & 1,11 \text{ Ni} + 1,43 \text{ Co} + 1,54 \text{ Mn} - 1 \text{ Al}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

où les symboles chimiques se lisent comme les pourcentages massiques des éléments d'alliage correspondants. Le coefficient multiplicateur devant chaque élément représente le ratio entre la quantité de molybdène nécessaire pour obtenir une structure de trempe 100% β (valeur d'environ 10% massique), et la quantité de l'élément X à considérer pour obtenir le même résultat. On note le coefficient négatif attribué à l'aluminium, mettant en valeur le caractère α -gène de cet élément.

Un autre indicateur, noté AIE, rend compte du caractère α -gène des éléments d'addition et peut être pris en compte en lieu et place de l'aluminium dans l'équation (1.1) (Cotton *et al.* [2015]) :

$$\text{AIE} = 1 \text{ Al} + 0,17 \text{ Zr} + 0,33 \text{ Sn} + 10 (\text{O} + \text{N}). \quad (1.2)$$

À noter qu'en général, une valeur de MoE de 10% mass. est requise pour stabiliser la structure de trempe 100% β (Bania [1994]) et qu'une augmentation de MoE est liée à une diminution de la température de transus T_β . Les MoE d'un nombre important d'alliages de titane sont reportés dans Welsch *et al.* [1993].

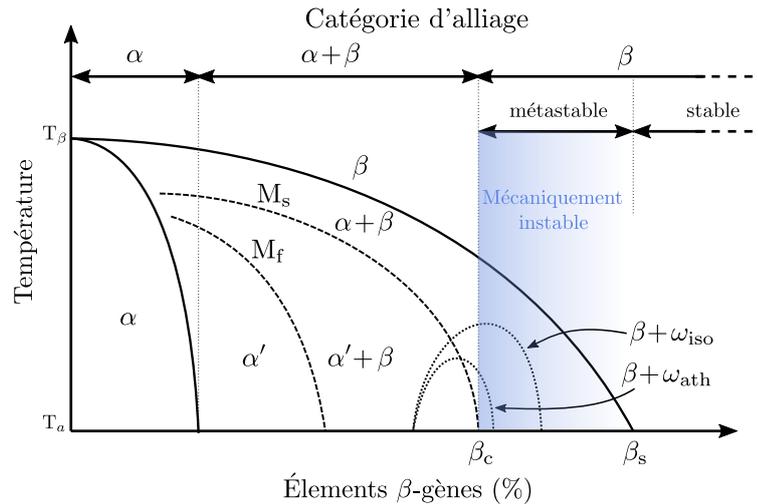


FIGURE 1.2 – Diagramme de phase schématisé des alliages de titane (inspiré de [Laheurte et al. \[2005\]](#) et [Zhang \[2014\]](#)). β_c représente la valeur minimale d'éléments β -gènes permettant d'obtenir une structure de trempe β (ou β -métastable); β_s est la teneur en éléments beta-gènes minimale pour que la phase β soit stable à température ambiante; T_β est la température de transus β ; T_a est la température ambiante; M_s et M_f sont respectivement les températures de début et de fin de transformation martensitique $\beta \rightarrow \alpha'$.

La [figure 1.2](#) montre un diagramme schématisé des alliages de titane, où l'axe des abscisses correspond à une quantité d'éléments β -gènes équivalente (liée au MoE) présente dans l'alliage. Les différentes catégories/classes d'alliage sont reportées en haut de la figure.

Les alliages α et quasi- α contiennent une quantité d'éléments β -gènes faible. Lors d'un refroidissement lent à partir de la phase β , la phase α apparaît sous forme de lamelles arrangées ou en vannerie. Plus le refroidissement est lent, plus on observe un épaissement d'aiguilles de phase α . À l'issue d'une trempe, on observe des aiguilles fines correspondant au produit de la transformation martensitique $\beta \rightarrow \alpha'$, de structure hexagonale compacte comme la phase d'équilibre ([Davis et al. \[1979\]](#)). Contrairement aux alliages monophasés α dont les propriétés mécaniques ne sont pas exceptionnelles, les alliages quasi- α présentent une très bonne tenue au fluage ([Weiss et Semiatin \[1999\]](#)) et une excellente résistance à l'oxydation ([Polmear et al. \[2017\]](#)) jusqu'à 600°C.

Les alliages $\alpha + \beta$, biphasés, contiennent suffisamment d'éléments β -gènes pour qu'à température ambiante les phases α et β coexistent à l'équilibre. Cette catégorie comprend de nombreux alliages et permet d'obtenir une grande variété de microstructures, impliquant généralement différentes morphologies de phase α , grâce à des traitements thermiques et thermo-mécaniques complexes, pouvant comporter jusqu'à quatre ou cinq étapes ([Semiatin et al. \[1997\]](#)). Lors de refroidissements rapides, la phase β peut subir des transformations displacives donnant naissance, d'une part à la martensite α' de structure hexagonale compacte sous forme de plaquettes très fines; d'autre part à la phase ω athermique (notée ω_{ath}) sous forme de précipités nanométriques distribués de manière homogène dans la phase β . Ces phases métastables se décomposent lors de revenus et de vieillissements ultérieurs : la martensite α' réverse en un mélange α et β avec partition des éléments d'alliage conformément au diagramme

de phase; les précipités d' ω_{ath} disparaissent au profit de précipités plus gros ($\mathcal{O}(10 - 100)$ nm) dits ω isotherme (ω_{iso}) pauvres en éléments β -gènes et dont la croissance est diffusive (Hickman [1969], Williams et Blackburn [1969], De Fontaine *et al.* [1971]). Les alliages $\alpha + \beta$ sont ceux que l'on retrouve le plus sur le marché, notamment dans le domaine de l'aéronautique (par ex. TA6V, Ti-6242). Ils couvrent en effet une large gamme de propriétés mécaniques grâce aux nombreuses microstructures qu'on peut obtenir par des traitements thermo-mécaniques complexes, mais industriellement réalisables.

Les alliages β contiennent suffisamment d'éléments β -gènes (à droite de β_c sur la figure 1.2) pour retenir la phase β lors de la trempe, et éventuellement de l' ω athermique (Bania [1994]). En effet, dans ces alliages la température M_s d' α' est inférieure à la température ambiante (figure 1.2). On distingue :

- **Les alliages β -stables** dont la teneur en éléments β -gènes est supérieure à β_s sur la figure 1.2. La phase β est stable thermodynamiquement à température ambiante, quelles que soient les conditions de refroidissement. Ils sont donc insensibles aux traitements thermiques et ne peuvent être durcis par précipitation. Si ces alliages correspondent bien à des MoE élevés, la corrélation entre le MoE et β_s n'est pas parfaite : ainsi, alors que le MoE du Ti-35V-15Cr est de 47,5, Bania [1994] relève qu'il est mécaniquement instable.
- **Les alliages β -métastables** correspondent à des teneurs en β -gènes comprises entre β_c et β_s . La phase β peut donc être retenue au cours d'une trempe (avec l'apparition éventuelle d' ω_{ath}), mais elle peut se décomposer au cours de traitements thermiques ou mécaniques post-trempe. Certains alliages β -métastables sont qualifiés de mécaniquement instables parce qu'ils se transforment sous l'action de contraintes extérieures. Leur comportement mécanique est particulier :
 - superélastique lorsque la phase β se transforme en martensite α'' (Ramarolahy *et al.* [2012]);
 - TRIP/TWIP (pour respectivement *Transformation* et *Twinning Induced Plasticity*) lorsque la phase β se déforme principalement par maclage en sus de l'apparition d' α'' (Sun *et al.* [2015], Brozek [2017], Danard [2019]).

1.1.3 Utilisation des alliages de titane β -métastables

Aux nombreuses microstructures qu'on peut obtenir dans les alliages de titane β -métastables est associée une vaste gamme de propriétés mécaniques intéressantes. Leurs domaines d'application sont par conséquent variés : aéronautique, biomédical, énergie, industrie chimique, automobile ou encore sport (Bania [1994], Peters *et al.* [2003], Zhao *et al.* [2012], Hosoda *et al.* [2017], Kolli et Devaraj [2018], Veiga *et al.* [2012]).

Ces alliages, à vocation structurale, sont généralement utilisés dans leur état biphasé $\alpha + \beta$ dans des applications requérant généralement une résistance spécifique élevée, une bonne résistance en fatigue et une excellente résistance à la corrosion. Par ailleurs, leur mise en forme à chaud est facilitée par leur transus plus bas que dans les autres familles d'alliages. En revanche, en raison de leur coût élevé, ils sont réservés à des secteurs à haute valeur ajoutée et des applications de niche (Banerjee et Williams [2013]). Pour citer quelques exemples, on retrouve l'alliage Beta-C (Ti-3Al-8V-6Cr-4Mo-4Zr) dans les ressorts et systèmes de fixation en aéronautique (Boyer [1994]), dans les tuyaux de transport souterrains et le matériel de forage dans l'industrie pétrochimique, mais aussi dans les équipements géothermiques

(Cotton *et al.* [2015]). L'alliage Ti-10-2-3 (Ti-10V-2Fe-3Al) est quant à lui utilisé pour les trains d'atterrissage des avions et hélicoptères (Cotton *et al.* [2015]). Les alliages les plus chargés en β -gènes présentent généralement des modules d'Young suffisamment faibles pour être bio-compatibles mécaniquement. On retrouve ainsi les alliages Ti-15Mo (ASTM International [2018]) et Ti-29Nb-13Ta-4,6Zr (Niinomi *et al.* [2002]) dans des implants osseux.

Ces dernières années, de nouveaux alliages ont été développés en s'inspirant des aciers Fe-Mn-Al (Frommeyer *et al.* [2003]) : d'excellentes propriétés à froid (résistance spécifique et ductilité) peuvent être obtenues en mobilisant la capacité de la phase β -métastable à se transformer en martensite α'' et à macler, donc en combinant les effets dits TRIP et TWIP (Marteleur *et al.* [2012], Brozek *et al.* [2016], Zhang *et al.* [2017]).

1.2 Mécanismes à l'origine du comportement mécanique des alliages de titane TRIP/TWIP

Les alliages de titane β -métastables à effet TRIP/TWIP ont une limite d'élasticité pouvant aller de 600 MPa à 900 MPa, associée à des valeurs d'élongation à la rupture de 30% à 45% et à une résistance mécanique pouvant atteindre $\sim 1,5$ GPa (voir figure 1.3). Comme on peut le voir sur la figure 1.3a où la résistance spécifique est tracée en fonction de l'allongement à la rupture, ces alliages s'écartent fortement du comportement des métaux purs et permettent d'atteindre le centre du diagramme, à la manière des aciers TWIP.

La figure 1.3b montre une courbe de traction à température ambiante de différents alliages de titane TRIP/TWIP (Danard [2019]). Ces essais de traction ont été réalisés à une vitesse de déformation $\dot{\epsilon} = 1,7 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. On note qu'ils présentent tous une limite d'élasticité supérieure à 600 MPa, des valeurs d'élongation à la rupture supérieures à 27%, et une résistance mécanique supérieure à 800 MPa. Cependant, on peut voir que l'écroutissage n'est pas le même pour tous les alliages. Pour l'alliage Ti-7Cr-1Al-1Fe (en jaune), l'écroutissage est pratiquement linéaire. En revanche, dans d'autres alliages TRIP/TWIP, l'écroutissage n'est initialement pas linéaire (entre 1% et 10% de déformation vraie). Cette différence de comportement est directement liée à l'évolution de la microstructure au cours de la déformation, avec l'activation de différents modes de déformation : glissement cristallographique, transformation martensitique $\beta \rightarrow \alpha''$ sous contrainte et maclage mécanique.

Cette combinaison de modes de déformation conduit à une microstructure complexe. En effet, au cours de la déformation, un réseau de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ enchevêtrées se développe à l'échelle des grains, comme l'illustre la figure 1.4. Obtenues par EBSD (*Electron BackScattered Diffraction*), ces micrographies montrent que le réseau est constitué de deux ou trois variants de macle parmi les douze possibles correspondant aux douze plans (332) équivalents dans une structure cubique (voir Annexe B). Cette microstructure mobilise également à une échelle plus fine la martensite orthorhombique α'' (figure 1.5) et une morphologie particulière de la phase ω .

C'est cette microstructure particulière qui est à l'origine de l'effet TWIP, la ductilité étant assurée par les déformations propres portées par les macles et la martensite, et l'écroutissage par un effet dit Hall-Petch

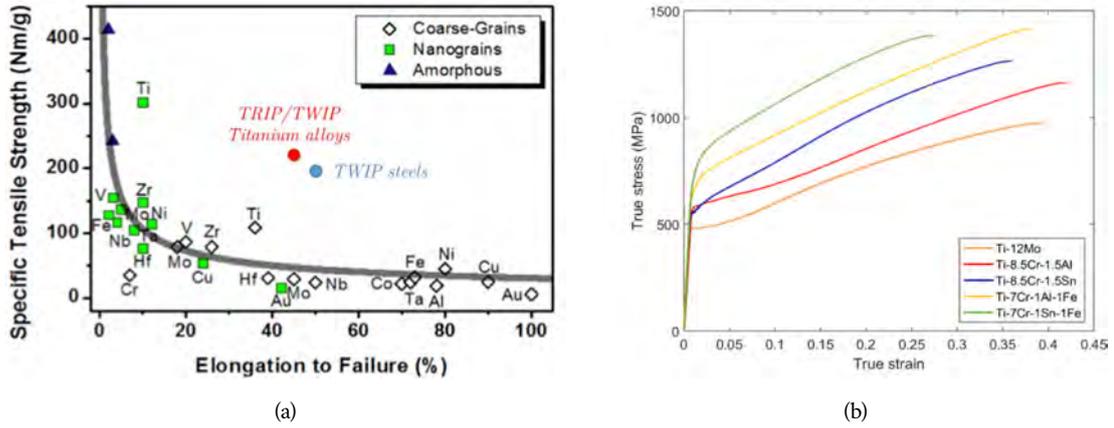


FIGURE 1.3 – (a) Résistance spécifique fonction de l’allongement à rupture de différents métaux (Brozek [2017]). (b) Courbes de traction de différents alliages de titane de type TRIP/TWIP (Danard [2019]).

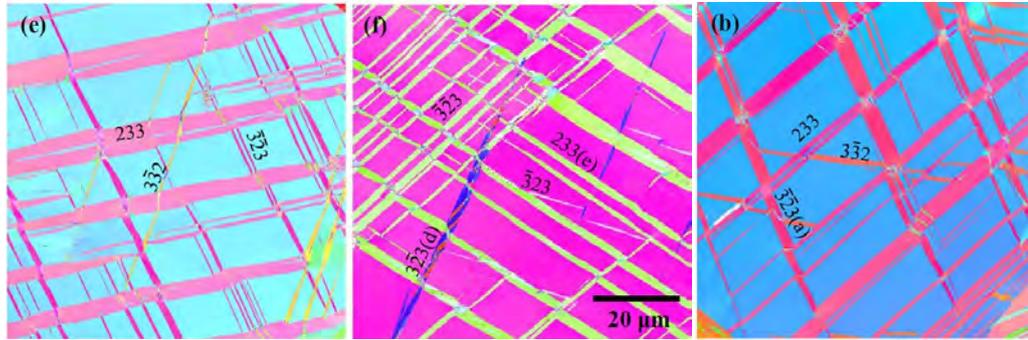


FIGURE 1.4 – Micrographies EBSD d’un alliage Ti-15Mo (% massique) après traction uniaxiale à 5% à température ambiante (Zhou *et al.* [2017]). Chacune des micrographies montre l’intérieur d’un grain (couleur de fond) traversé par un nombre variable de variants de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ formant une microstructure en “squelette”.

dynamique où le libre parcours moyen des dislocations dans la matrice β se réduit à mesure que de nouvelles macles apparaissent (Sun *et al.* [2013], Lilensten *et al.* [2019]).

1.2.1 Glissement cristallographique

La déformation permanente des métaux, dite plastique, repose dans la majorité des cas sur le glissement cristallographique dû au déplacement des dislocations dans des plans et le long de directions cristallographiques spécifiques.

Les plans et directions cristallographiques dans et selon lesquels se déplacent les dislocations (définissant des systèmes de glissement) sont généralement denses. Dans le cas des matériaux cubiques centrés, les systèmes de glissement sont de type $\{1\bar{1}0\} \langle 111 \rangle$, $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$ et $\{12\bar{3}\} \langle 111 \rangle$ (Taylor et Elam [1926]).

Dans la phase β des alliages de titane, seul le système de glissement $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$ est observé expérimentalement (Yang *et al.* [2009], Yao *et al.* [2017]). Ishiyama *et al.* [1991] et Abdel-Hady *et al.* [2006] montrent que le glissement cristallographique est le mode de déformation préférentiel lorsque la te-

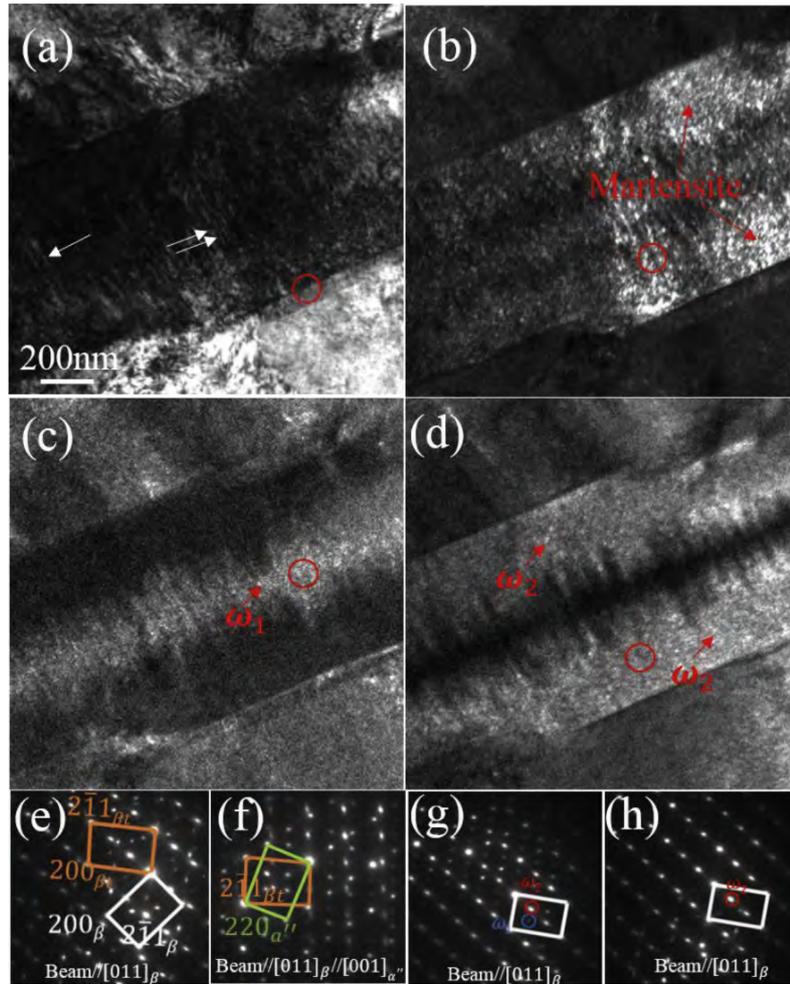


FIGURE 1.5 – Micrographies MET (Microscopie Électronique à Transmission) et clichés de diffraction associés d'un alliage Ti-7Mo-3Cr (% massique) après traction uniaxiale à 5% à température ambiante (Gao *et al.* [2018]). En partant de la phase β , on retrouve après déformation des macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, de la martensite α'' et de ω .

neur en éléments d'alliage est suffisante pour que la phase β soit mécaniquement stable. Dans ce cas, la limite d'élasticité est de l'ordre de 900 MPa à 1 GPa mais la ductilité ne dépasse pas les 10% (Hanada *et al.* [1986]). En revanche, dans les alliages TRIP/TWIP la ductilité est bien plus grande et les dislocations ne sont observées qu'associées aux macles (figure 1.6), mode de déformation principal (Hanada *et al.* [1985], Furuhashi *et al.* [1994]).

1.2.2 Transformations de phase sous contrainte

1.2.2.1 Phase ω induite sous contrainte

La phase ω_{ath} est généralement observée dans les alliages de titane β -métastables de type TRIP / TWIP, avant déformation dans la matrice initiale. Des précipités nanométriques d' ω_{ath} apparaissent lors d'une trempe, plus ou moins sphériques et répartis de manière homogène dans la matrice β . Le mécanisme à l'échelle atomique de la transformation $\beta \rightarrow \omega_{ath}$ a été suggéré par Hatt et Roberts dans des alliages de Zr (Hatt et Roberts [1960]), repris par Sass pour les alliages de titane (Sass [1969]) et ra-

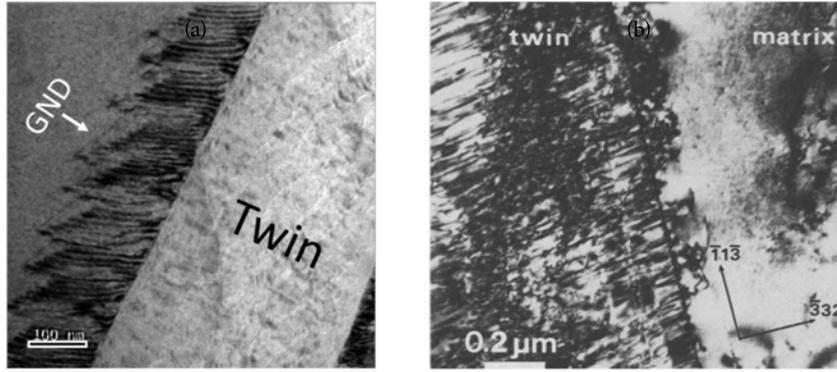


FIGURE 1.6 – Micrographies MET de macles $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$ et de dislocations (a) localisées au joint de macle dans un alliage Ti-Mo-Zr (Qian [2018, thèse en cours]); (b) distribuées dans la macle dans un alliage Ti-22V (Hanada *et al.* [1985]).

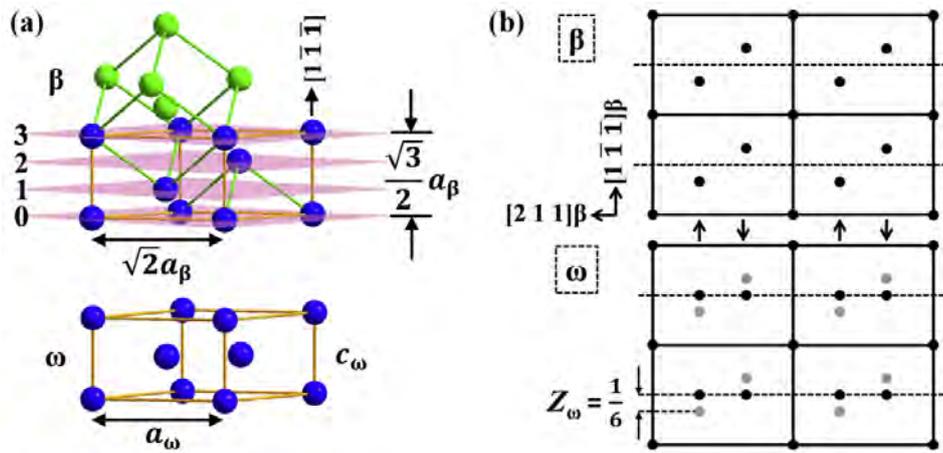


FIGURE 1.7 – Relations entre les phases β , c.c., et ω , hexagonale simple (Lai *et al.* [2015]). (a) Représentation de la maille c.c. en vert, avec en bleu les sites de la future maille hexagonale. (b) Projection $(0\bar{1}1)_\beta // (1\bar{2}10)_\omega$ illustrant le *shuffle* possible pour réaliser la transformation $\beta \rightarrow \omega$.

tionalisé par De Fontaine (de Fontaine [1970]) : il consisterait en l'effondrement de deux plans adjacents sur trois de type $\{111\}$ de la structure cubique centrée, comme illustré sur la figure 1.7. Lorsque la teneur en éléments β -gènes est conséquente ($\text{MoE} \geq 12$), la fraction volumique d' ω_{ath} est relativement faible (Blackburn et Feeney [1970], Nemirovskii [1998], Marteleur *et al.* [2012], Sun *et al.* [2013], Sun *et al.* [2015]).

Au cours de la déformation, la fraction de phase ω augmente. Sun *et al.* [2013] a clairement observé cette augmentation dans un alliage Ti-12Mo lors d'essais de traction par diffraction des rayons X (DRX) haute énergie in situ. Dans la mesure où la phase ω produite sous contrainte adopte une morphologie en fines plaquettes (Banerjee *et al.* [2006]) différente de celle d' ω_{ath} , on la désigne par ω_s (s pour « stress »). Par ailleurs, Sun *et al.* [2013] ainsi que Blackburn et Feeney [1970] dans un alliage Ti-11,5Mo-6Zr-4,5Sn ont observé que la fraction d' ω diminue jusqu'à disparaître au-delà d'une déformation de l'ordre de 7%. Hanada *et al.* [1986] ont réalisé des essais de traction à température ambiante sur divers alliages β -

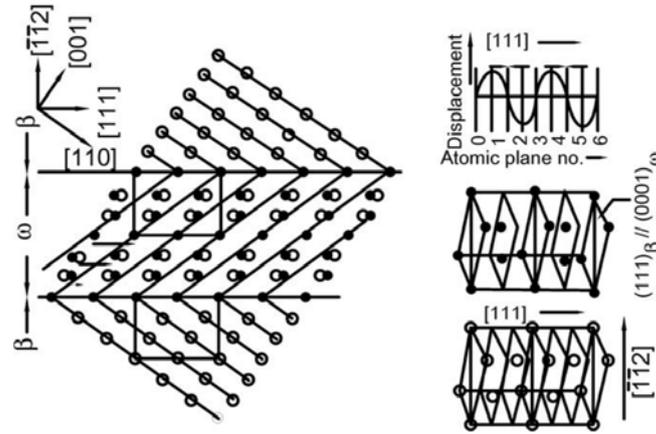


FIGURE 1.8 – Formation de ω_s à partir d'un mécanisme associant cisaillement homogène et *shuffle* (Banerjee *et al.* [2006]). Les plans $(\bar{1}\bar{1}2)$ sont cisailés dans la direction $[111]$; le *shuffle* est décrit en haut à droite de la figure.

métastables Ti-Mo, Ti-V, Ti-Fe et Ti-Nb. Pour expliquer pourquoi ils n'observent la formation d' ω_s que dans les alliages les moins chargés en β -gènes, ils ont étudié par microscopie électronique à transmission l'écart d' ω à sa structure idéale en fonction de la teneur en β -gènes. Ainsi, il s'avère que plus les alliages sont riches en β -gènes, plus les tâches de diffraction correspondant aux plans $\{0002\}_\omega$ s'écartent de leurs positions idéales en axe de zone $\langle 110 \rangle_\beta$. Alors que pour une structure idéale $\xi = d_{0002_\omega}^* / d_{222_\beta}^* = 0,667$ ¹, ce rapport a tendance à décroître avec les concentrations croissantes en éléments β -gènes. Pour $\xi < 0,66$, la phase ω_s n'est pas observée et les alliages se déforment par glissement cristallographique. On peut souligner que ce critère a par la suite été appliqué par Nemirovskii [1998] pour expliquer la disparition du maillage $\{332\}\langle 11\bar{3} \rangle$ dans les alliages très chargés en β -gènes. Pour expliquer la morphologie particulière d' ω_s en plaquettes accolées à β suivant des plans $\{112\}$ (Sun *et al.* [2013]), certains auteurs ont proposé de réinterpréter le mécanisme d'effondrement des plans $\{111\}$ comme l'association d'un cisaillement dans les plans $\{112\}$ suivant les directions $\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ et d'un *shuffle* (voir figure 1.8). On peut souligner que l'importance du cisaillement des plans $\{112\}$ avait déjà été identifiée par Hatt et Roberts [1960] dans les alliages de Zr.

Par ailleurs, il est remarquable que l'apparition d' ω_s soit souvent concomitante aux macles $\{112\}\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ mettant en jeu le cisaillement mentionné (voir plus loin Section 1.2.3), comme l'ont systématiquement étudiée Xing et Sun [2008], puis Sun *et al.* [2013] et Lai *et al.* [2015]. Si dans ces travaux, ω_s est retrouvée majoritairement aux joints de macles $\{112\}\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$, certains variants d' ω_s sont localisés à l'intérieur des macles. Il faut souligner que des observations similaires ont été réalisées aux joints des macles $\{332\}\langle 11\bar{3} \rangle$ (Marteleur *et al.* [2012], Hanada et Izumi [1986]) et à leurs frontières (Hanada *et al.* [1985], Lai *et al.* [2016]), même si le lien entre les mécanismes à l'échelle atomique est moins évident à percevoir.

En résumé, la formation de la phase ω_s est étroitement liée à la stabilité de la phase β et aux autres modes de déformation dans les alliages de titane β -métastables. Son rôle en tant que mode de défor-

1. d_{hkl}^* , représentant l'inverse de la distance entre les plans (hkl) , est mesuré sur les clichés de diffraction.

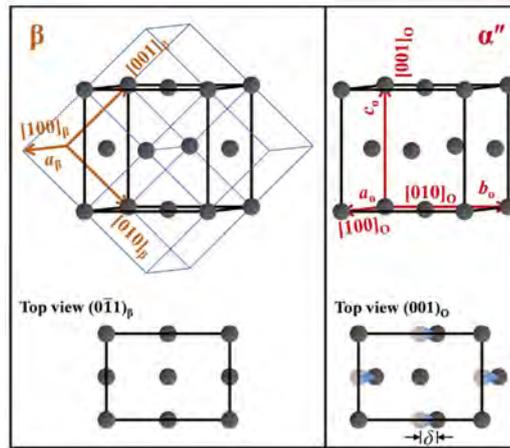


FIGURE 1.9 – Relations d'orientation entre β (c.c.) et α'' (orthorhombique), et *shuffle* nécessaire à l'obtention du réseau orthorhombique (Lai *et al.* [2016]).

mation sur les propriétés mécaniques reste encore à identifier. De par sa faible fraction volumique, on peut penser que sa contribution directe à la plasticité reste limitée.

1.2.2.2 Phase α'' induite sous contrainte

Certains auteurs présentent la phase orthorhombique α'' comme une phase intermédiaire entre la phase β et la phase α (Inamura *et al.* [2007], Li *et al.* [2013]). En effet, le mécanisme à l'échelle atomique qu'on peut proposer pour expliquer sa formation est très proche de celui de Burgers pour la phase α (Burgers [1934]). Ce dernier repose sur un cisaillement selon les plans $\{112\}$ et dans les directions $\langle 11\bar{1} \rangle$, suivi ou précédé d'un *shuffle* d'un plan $\{1\bar{1}0\}$ sur deux, dans les directions $\langle 110 \rangle$. La transformation $\beta \rightarrow \alpha''$ peut être décrite de façon similaire par les mêmes cisaillement et *shuffle* mais d'amplitudes moins importantes. Les relations d'orientation entre les phases β et α'' sont illustrées sur la figure 1.9 (Lai *et al.* [2016]).

Dans les alliages de titane β -métastables mécaniquement instables, on peut former la phase α'' à température ambiante, au-dessus de M_s (figure 1.2), en appliquant une contrainte (Grosdidier et Philippe [2000], Sun *et al.* [2015], Lai *et al.* [2016]). Tout comme la transformation $\beta \rightarrow \omega_s$, il s'agit d'une transformation displacive. Elle est de surcroît qualifiée de martensitique car elle met en jeu une déformation à forte composante de cisaillement. Cette transformation sous contrainte a été largement étudiée, notamment pour ses capacités de réversion lors du relâchement de la contrainte, permettant de générer un comportement superélastique (Duerig *et al.* [1982], Grosdidier et Philippe [2000], Paradkar *et al.* [2008]).

Cette transformation est également à l'origine de l'effet TRIP dans les alliages de titane β -métastables. Dans les aciers TRIP, cet effet est bien connu et permet d'obtenir des matériaux présentant une haute résistance mécanique et une ductilité élevée en utilisant, dans le domaine plastique, la déformation associée à la transformation martensitique pour accommoder une partie de la contrainte appliquée (Olson et Azrin [1978], Yu [2008]). De manière analogue dans les alliages de titane mécaniquement instables, on peut utiliser la transformation $\beta \rightarrow \alpha''$ (Karasevskaya *et al.* [2003], Marteleur *et al.* [2012],

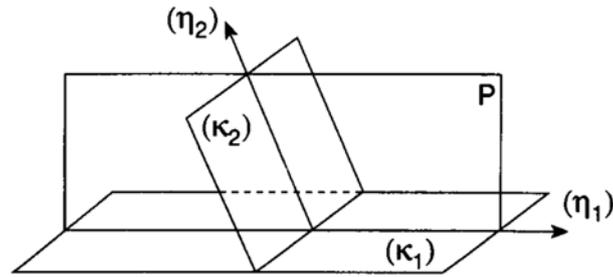


FIGURE 1.10 – Représentation schématique des quatre éléments géométriques définissant un système de maclage. Les directions η_1 et η_2 ainsi que les normales au plan de maclage (K_1) et au plan de maclage réciproque (K_2) sont toutes contenues dans le plan (P) (Christian et Mahajan [1995]).

Sadeghpour *et al.* [2015], Sun *et al.* [2015]). Dans les alliages sujets également au maclage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$, la phase α'' se présente sous forme de plaquettes dites primaires, parce que localisées dans la matrice β , souvent proches ou aux joints de macles (Lai *et al.* [2016]). On la retrouve également à l'intérieur des macles, en relation d'orientation avec la structure c.c. maclée : on qualifie alors α'' de secondaire (Sun *et al.* [2015], Lilensten *et al.* [2019]).

1.2.3 Maclage mécanique

1.2.3.1 Généralités

Le maclage mécanique est un mode de déformation plastique dont la description formelle est similaire à celle des transformations martensitiques. En effet, on peut décrire les deux transformations comme procédant d'une déformation homogène dominée par un cisaillement qui laisse un plan particulier invariant. De ce point de vue, le maclage se différencie d'une transformation martensitique par son produit de transformation identique à la phase de départ, à une rotation particulière près. Dans le cas des métaux c.c., la rotation doit correspondre à une réflexion par rapport au joint de macle et une rotation de 180° par rapport à sa normale (Christian et Mahajan [1995]). Par ailleurs, la déformation correspond à un cisaillement simple parallèle au joint de macle dont la manifestation macroscopique est visible par une déflexion de la surface où la macle débouche.

À basse température, le maclage mécanique est l'un des modes de déformation privilégié dans les métaux. On le retrouve par exemple dans les métaux/alliages de structure cubique centrée (Cahn [1954], Lagerlöf [1993]), hexagonale compacte (Yoo et Lee [1991], Wu *et al.* [2011]), ou cubique faces centrées (c.f.c.) (Suzuki et Barrett [1958], El-Danaf *et al.* [1999]). Pour définir les différents systèmes de maclage mécanique, on utilise deux éléments géométriques parmi les quatre qui restent invariants lors du cisaillement simple produisant une macle, à savoir (figure 1.10) :

- le plan de maclage, ou plan invariant par cisaillement, noté (K_1);
- la direction de cisaillement ou de maclage, notée $\underline{\eta}_1$, comprise dans le plan (K_1);
- le plan noté (K_2) subissant une simple rotation;
- la direction notée $\underline{\eta}_2$ comprise dans le plan (K_2) perpendiculairement à (K_1).

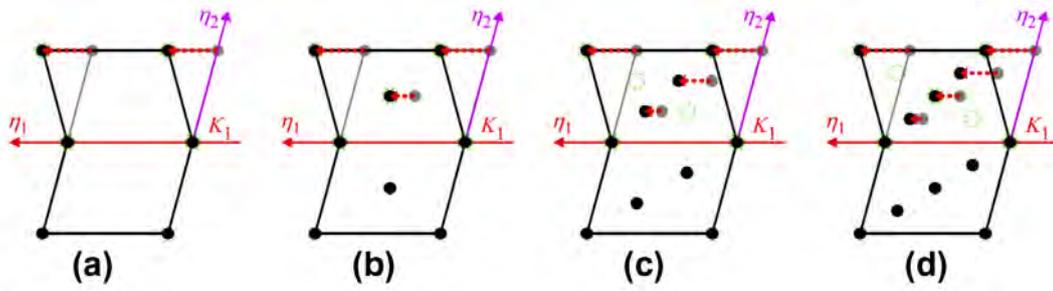


FIGURE 1.11 – Modes de maillage pour q variant de 1 à 4 (de a à d) (Tobe *et al.* [2014]). Les flèches rouges en pointillés correspondent aux déplacements induits par le cisaillement. Les cercles verts en pointillés correspondent aux positions correctes du réseau maillé. Un *shuffle* est nécessaire dans les cas (c) et (d) pour atteindre les positions correctes du réseau maillé.

Le plan contenant $\underline{\eta}_1$ et $\underline{\eta}_2$, noté (P), est le plan dit de cisaillement.

Dans le cas général, la donnée du couple $(K_1), \underline{\eta}_2$ ou $(K_2), \underline{\eta}_1$ suffit pour définir un système de maillage. Dans le cas des phases cubiques dans les alliages métalliques, les quatre éléments géométriques appartiennent au réseau cristallin (leurs coordonnées exprimées dans le système de coordonnées du réseau cubique de départ sont des nombres rationnels) et le système est dit composé (ou dégénéré) : on préfère alors définir le système de maillage par la donnée du couple $(K_1), \underline{\eta}_1$ et de l'amplitude du cisaillement. Pour chaque système de maillage $(K_1), (K_2), \underline{\eta}_1, \underline{\eta}_2$, il existe un système de maillage conjugué (ou réciproque) $(K'_1), (K'_2), \underline{\eta}'_1, \underline{\eta}'_2$ de même amplitude de cisaillement, tel que $(K'_i) = (K_{j \neq i})$ et $\underline{\eta}'_i = \underline{\eta}'_{i \neq j}$. Les éléments $\underline{\eta}_2$ et (K_2) sont ainsi nommés respectivement direction de maillage réciproque et plan de maillage réciproque.

Bilby et Crocker [1965] ont montré qu'un cisaillement homogène décrit par les éléments géométriques introduits ci-dessus n'est pas toujours suffisant pour reconstruire le réseau cristallin en relation de macle. Ils introduisent alors la notion de *shuffle* (appelé parfois mode optique) concernant des déplacements coordonnés qui ne se réduisent pas à des déformations. Dans le cas des structures simples où un seul atome occupe les sites d'un réseau de Bravais, il est facile de savoir si le maillage requiert un *shuffle* en sus du cisaillement, et quel en est le degré de complexité.

Comme illustré sur la figure 1.11, on considère les mailles 2D construites à partir de deux vecteurs primitifs (c'est-à-dire rejoignant des nœuds voisins) du réseau dans le plan de cisaillement (P), parallèles à $\underline{\eta}_1$ et $\underline{\eta}_2$ respectivement. On compte alors le nombre q de plans du réseau parallèles à (K_1) qui coupent le vecteur primitif parallèle à $\underline{\eta}_2$. Lorsque $q \leq 2$, tous les atomes se retrouvent aux bonnes positions² après cisaillement homogène. Dans le cas contraire, seuls $1/q$ ou $2/q$ des plans se déplacent aux bonnes positions quand q est respectivement pair ou impair (Crocker [1962]).

Comme les cisaillements et *shuffle* possibles ne sont généralement pas uniques, Bilby et Crocker [1965] ont proposé quatre critères pour sélectionner ceux qui sont les plus plausibles pour un système de maillage donné :

- le cisaillement doit être de faible amplitude ;
- le mécanisme de *shuffle* doit être simple, c'est-à-dire que q doit être le plus petit possible ;

2. Les bonnes positions correspondent ici aux positions en relation de macle avec le réseau initial.

- les mouvements atomiques du *shuffle* doivent être de faibles amplitudes;
- le *shuffle* devrait être dans la direction parallèle au cisaillement plutôt que perpendiculaire à celui-ci.

Cette théorie permet de retrouver un nombre important de systèmes de maclage observés expérimentalement.

1.2.3.2 Maclage dans les structures cubiques centrées

Dans le cas des métaux c.c., les deux modes de maclage observés expérimentalement, à savoir $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ et $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, avaient été identifiés par Crocker [1962] en utilisant les critères énoncés ci-dessus : $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ est le plus courant, alors que $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ n'a été observé, jusqu'à maintenant, que dans les alliages β -métastables (Blackburn et Feeney [1970], Rusakov *et al.* [2006], Marteleur *et al.* [2012]). Le tableau 1.1 référence les caractéristiques liés à ces deux modes de maclage.

(K_1)	(K_2)	η_1	η_2	s	q
$\{112\}$	$\{\bar{1}\bar{1}2\}$	$\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\sqrt{2}/2$	2
$\{332\}$	$\{11\bar{2}\}$	$\langle 11\bar{3} \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\sqrt{2}/4$	4

TABLEAU 1.1 – Caractéristiques des systèmes de maclage observés expérimentalement dans les métaux et alliages métalliques cubiques centrés.

Comme le montre le tableau 1.1 et la figure 1.12, le maclage $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ ne nécessite qu'un mécanisme de cisaillement pour que tous les atomes soient amenés aux positions correctes. C'est le mode de maclage le plus répandu dans les matériaux c.c. (Priestner et Leslie [1965], Boucher et Christian [1972]). Par ailleurs, il peut être associé à la dissociation de dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ en trois dislocations partielles $\frac{1}{6}\langle 111 \rangle$, formant un domaine micro-maclé de trois plans atomiques d'épaisseur (Mahajan [1975], Hsiung et Lassila [2000], Xing et Sun [2008]). À noter qu'un mécanisme similaire de dissociation de dislocations $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ est également évoqué par Hsiung et Lassila [2000] et Xing et Sun [2008] comme étant à l'origine de la formation de la phase ω_s sous contrainte.

1.2.3.3 Système de maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$

Contrairement aux autres alliages cubiques centrés, les alliages de titane β -métastables présentent majoritairement des macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Ce mode de maclage, identifié par Crocker [1962] dans une étude sur la martensite dans les aciers, présente un cisaillement plus faible que le mode $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ mais nécessite un *shuffle* d'un plan sur deux ($q = 4$, tableau 1.1). Avant l'observation de ce mode dans un alliage de titane Beta III par Blackburn et Feeney [1970], il était implicitement supposé que le critère sur la simplicité du *shuffle* l'emporte sur celui d'un cisaillement de faible amplitude. Cela permettait en effet d'expliquer l'occurrence des macles $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ dans les alliages cubiques centrés par le glissement coordonné de dislocations partielles comme dans les matériaux cubiques à faces centrées.

Évidemment, la singularité du comportement des alliages de titane β -métastables, mettant à mal cette

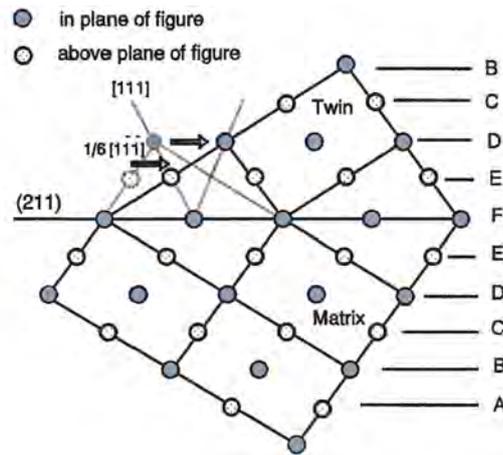


FIGURE 1.12 – Représentation selon $[0\bar{1}1]$ du maillage $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ (Hsiung et Lassila [2000]). Le déplacement du plan E supérieur est associé au vecteur de Burgers $\frac{1}{6} [1\bar{1}\bar{1}]$ d'une dislocation partielle.

hiérarchie, a conduit de nombreux chercheurs à s'y intéresser. En reprenant l'étude de Crocker [1962], Tobe *et al.* [2014] ont ordonné les modes de maillage possibles des c.c. par amplitude de cisaillement et *shuffle* croissants. Le mode $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ est celui de plus faible cisaillement mais requiert un *shuffle* suivant une direction $\langle 111 \rangle_{\beta_{tw}}$ dans un plan $\{11\bar{2}\}_{\beta_{tw}}$ sur deux³, dont l'amplitude $\sqrt{3}/4 a_{\beta}$ ⁴ est considérée comme importante (figure 1.13a).

En présence du *shuffle*, la description du processus local conduisant à la formation d'une macle de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ ne peut pas reposer simplement sur le glissement de dislocations partielles. On trouve donc plusieurs propositions invoquant

- soit la formation d'une couche intermédiaire de phase ω_s permettant de diminuer le *shuffle* (Takemoto *et al.* [1993]);
- soit la propagation d'une dislocation dite zonale, associant cisaillement et *shuffle* (Litvinov *et al.* [1997], Litvinov et Rusakov [2000], Rusakov *et al.* [2006]).

Les éléments précédents ne permettent pas de comprendre pourquoi on observe majoritairement des macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ plutôt que $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ dans les alliages de titane β -métastables TRIP/TWIP. C'est d'autant plus vrai que l'examen de la liste établie par Tobe *et al.* [2014] montre que le mode conjugué $\{112\} \langle 11\bar{1} \rangle$ présente les mêmes amplitudes de cisaillement et de *shuffle* (figure 1.13b) que le mode $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, et qu'expliquer la préséance du système $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ sur $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ par la différence de cisaillement ne tient pas. Il faut en effet souligner qu'il ne nous paraît pas évident de déduire le mécanisme à l'échelle atomique de l'observation mésoscopique des macles⁵ et donc d'associer des macles $\{112\}$ au cisaillement $\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ ou au cisaillement $\langle 11\bar{1} \rangle$ assisté d'un *shuffle*⁶.

Ce n'est que récemment que des travaux ont cherché la raison pour laquelle le mode $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ serait favorisé par rapport au mode $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$. Schématiquement, deux mécanismes semblent s'opposer,

3. β_{tw} en indice représente la phase c.c. maillée.
 4. a_{β} est le paramètre de la maille cubique.
 5. Du moins dans les alliages métalliques cubiques.
 6. Dans le cas des macles de plan de composition $\{112\}$, la donnée de deux éléments de maillage sans les spécifier peut prêter à confusion : ainsi, Paris *et al.* [1976] dans leur article sur le maillage dans des alliages Ti-20V et Ti-40V parlent-ils de mode $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$ en lui associant le mécanisme sans *shuffle*.

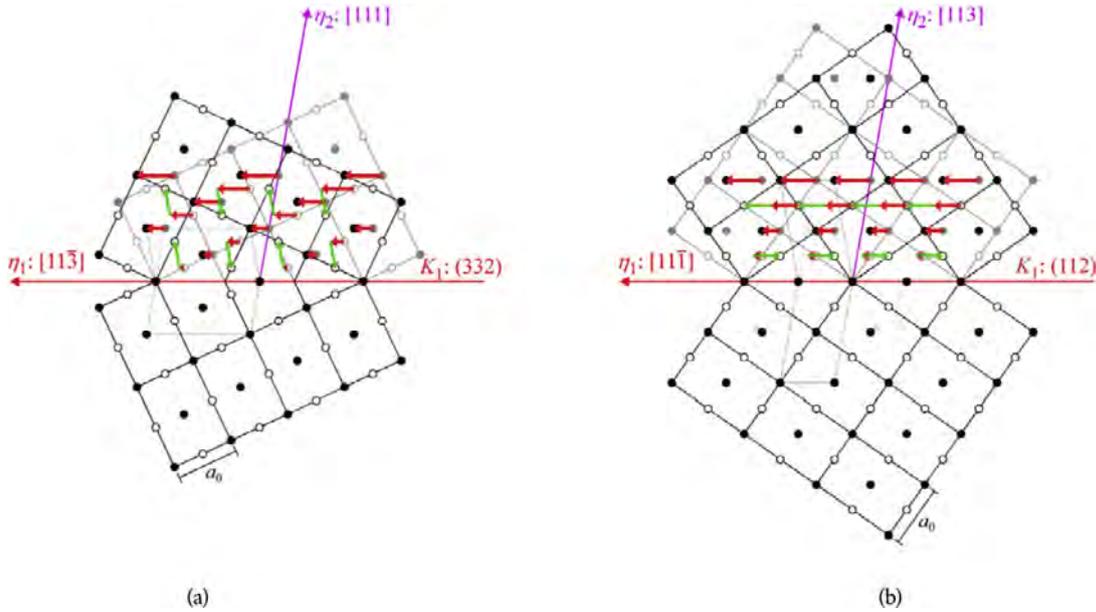


FIGURE 1.13 – Représentation schématique des mécanismes à l’origine (a) du mode de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ et (b) du mode de maillage réciproque $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$ (Tobe *et al.* [2014]). Les flèches rouges correspondent au déplacement des atomes induits par le cisaillement homogène, les flèches vertes au *shuffle*.

sans qu’on sache vraiment s’ils ne sont pas spécifiques aux alliages pour lesquels ils ont été proposés. Le premier a été avancé par Tobe *et al.* [2014]. Ils supposent qu’une modulation de la structure c.c. serait à l’origine de la formation préférentielle du mode de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Cette modulation, déduite de clichés de diffraction électronique de la phase β , serait associée au faible module de cisaillement $C' = (C_{11} - C_{12})/2$ dans les plans $\{0\bar{1}1\}$ et directions $\langle 011 \rangle$. Elle est décrite comme un *shuffle* d’un plan $\{0\bar{1}1\}$ sur deux, dans les directions $\langle 011 \rangle$. Alors que Kim *et al.* [2013] l’attribuent aux atomes d’oxygène distribués dans des sites interstitiels octaédriques, elle est considérée par Zheng *et al.* [2016] comme une nouvelle phase appelée O’, sous forme de nano-domaines répartis de manière uniforme dans β . On note que ce mécanisme est l’une des opérations de la transformation $\beta \rightarrow \alpha''$ sous contrainte (voir Section 1.2.2.2). Le réseau c.c. modulé devient un réseau tétragonal (quadratique) centré à motif double. En appliquant la théorie cristallographique de Crocker [1962] et Bilby et Crocker [1965] à ce réseau, Tobe *et al.* [2014] montrent que les modes de maillage $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$ et $\{11\bar{2}\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ requièrent des cisaillements et des *shuffles* beaucoup plus importants que le mode $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Si ce mécanisme est relativement séduisant, il n’a été repris que très récemment par Liang *et al.* [2020] dans le cas d’un alliage Ti-24Nb-4Zr-8Sn (% massique), en attribuant la sélection du mode de maillage à la présence de nano-domaines O’, et où les phases ω_s et α'' joueraient un rôle d’accommodation des joints de macles.

Le second scénario visant à expliquer l’apparition du mode $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ plutôt que $\{11\bar{2}\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ repose sur la réversion de la phase α'' . En effet, dès les premières observations de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, dans du Beta III, Blackburn et Feeney [1970] suggèrent que la martensite α'' se forme sous contrainte puis réverse en macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ lors de la décharge. On retrouve une analyse semblable dans Wasilewski [1977] pour le cas du maillage $\{11\bar{2}\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$. L’hypothèse de formation de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ par réversion d’ α'' a été reprise par Nemirovskii [1998], et plus récemment étayée par Castany *et al.* [2016],

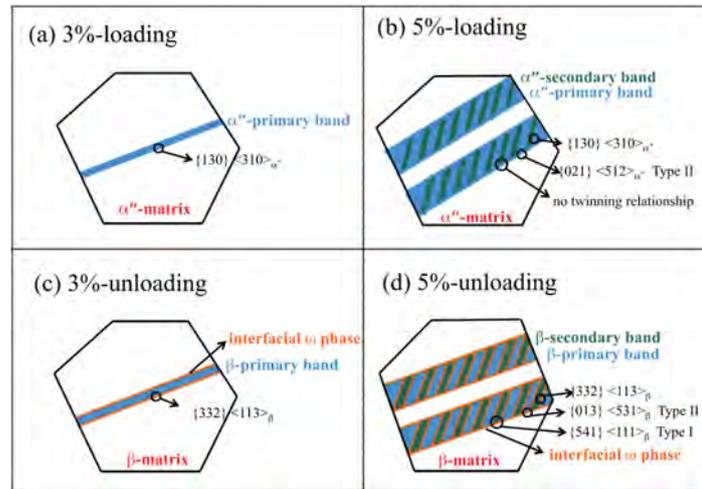


FIGURE 1.14 – Scénario de transformation $\beta \rightarrow \alpha'' \rightarrow \alpha'' \text{ twin} \rightarrow (\{332\} \text{ twin} + \omega_s)$ proposé par *Yang et al.* [2020] dans un alliage Ti-24Nb-4Zr-8Sn (% massique). On note la similarité du processus proposé par *Cho et al.* [2020] concernant l’alliage Ti-12Mo (% massique).

Lai et al. [2016] et *Yang et al.* [2020] dans divers alliages riches en Nb.

Ainsi, *Castany et al.* [2016] ont étudié in situ l’évolution de l’alliage Ti-42Nb (% massique) pendant un essai de traction cyclique par DRX haute énergie. Ils ont observé que l’alliage, après 5% de déformation, présente une microstructure totalement α'' avant décharge. Après décharge, la microstructure est constituée à 100% de β présentant des macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ bordées d’ ω_s . C’est l’organisation de la microstructure martensitique avec des variants en relation de maclage $\{130\}_{\alpha''} \langle 310 \rangle_{\alpha''}$ qui donnerait naissance au maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans la phase β suite à la réversion.

Parallèlement, *Lai et al.* [2016] ont abouti à une conclusion similaire sur un alliage Ti-36Nb-2Ta-3Zr (% massique) de manière indirecte par EBSD et MET post-mortem, en interprétant la présence d’ α'' en surface dans des macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, et sa réversion après recuit. En effet, les déflexions de surface associées aux macles qu’ils mesurent sont plus faibles que celles produites par le cisaillement théorique accompagnant le maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ (tableau 1.1), mais plus proches d’un processus reposant sur un cisaillement $\{211\}_{\beta_{tw}} \langle \bar{1}11 \rangle_{\beta_{tw}}$. Par ailleurs, ils observent des réseaux d’ ω_s parallèles orientés dans la direction de ce cisaillement dans les bandes de macles. Tout concorde donc pour confirmer le mécanisme par réversion de la phase α'' .

Enfin, très récemment, *Yang et al.* [2020] ont combiné DRX haute énergie in situ, analyses EBSD et MET pour étudier l’évolution d’un alliage Ti-24Nb-4Zr-8Sn (% massique). Ils montrent sans ambiguïté que seul un passage par α'' permet d’expliquer de manière cohérente toutes leurs mesures et observations. En effet, comme dans le Ti-42Nb, β se transforme presque intégralement en α'' . D’autre part, les relations d’orientation entre macles et matrice correspondent à des modes de maillage inhabituels qui s’expliquent naturellement par la réversion d’une microstructure α'' composée de plusieurs variants (voir figure 1.14).

Même si les conclusions de cette étude s’opposent à celles de *Liang et al.* [2020] sur le même alliage (voir plus haut), il semblerait que le mécanisme de réversion soit le plus probable pour les alliages riches en Nb. On pourrait d’ailleurs concevoir que la présence de nano-domaines O’ favorise l’apparition de la

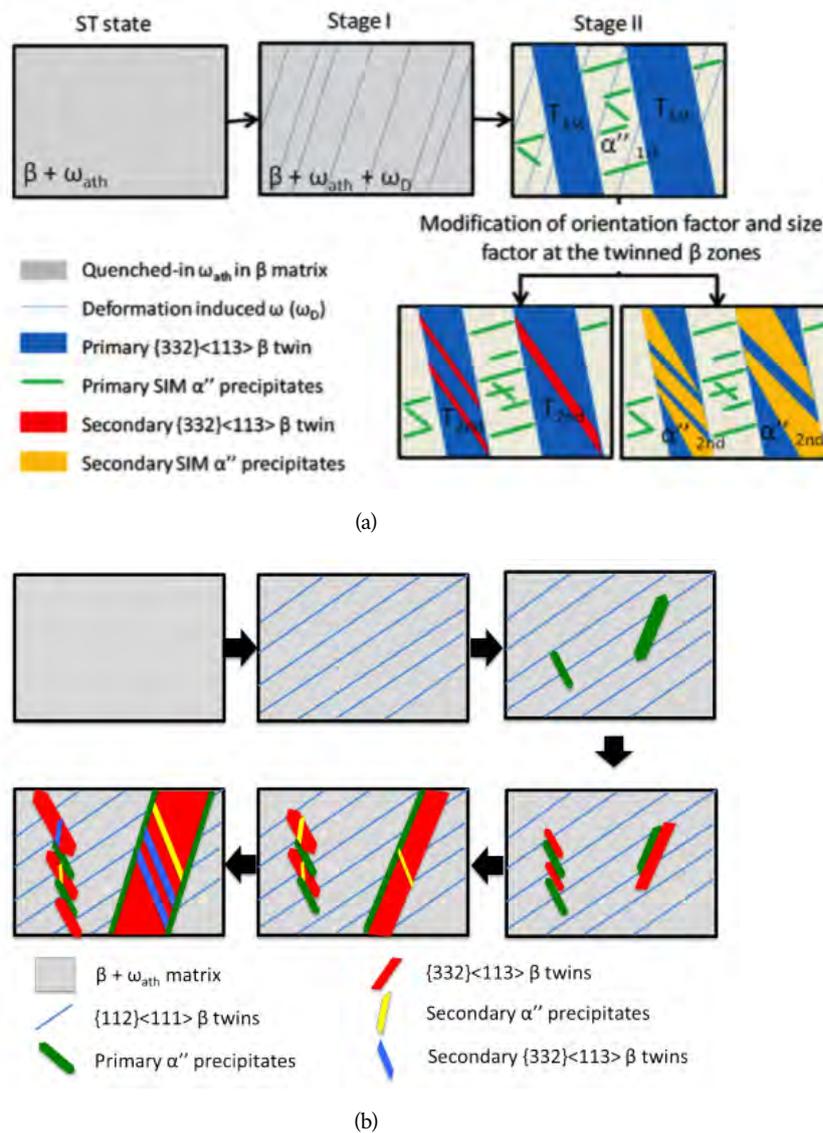


FIGURE 1.15 – Scénarios d'évolution de la microstructure d'un alliage Ti-12Mo lors d'un essai de traction, proposés par (a) Sun *et al.* [2013] et (b) Marteleur [2017].

phase α'' sous contrainte dans la mesure où O' et α'' partagent le même *shuffle*.

On pourrait donc conclure des travaux que nous venons de passer en revue que le mécanisme de réversion opère également dans les alliages TRIP/TWIP. Néanmoins, un ensemble d'analyses montrent que l'évolution microstructurale y est plus complexe, bien que mettant en jeu les ingrédients déjà rencontrés. La difficulté principale provient de ce que la fraction d' α'' reste modérée bien que croissante avec la déformation, de telle sorte qu'il est difficile d'attribuer de manière univoque l'apparition des macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ à la réversion d' α'' .

C'est en effet ce que Sun *et al.* [2013] ont mesuré in situ dans l'alliage Ti-12Mo par DRX haute énergie. Sur la base d'analyses EBSD et MET complémentaires, ils ont proposé un scénario repris sur la figure 1.15a. Même s'ils ont détecté la réversion localement dans certaines macles, les auteurs n'at-

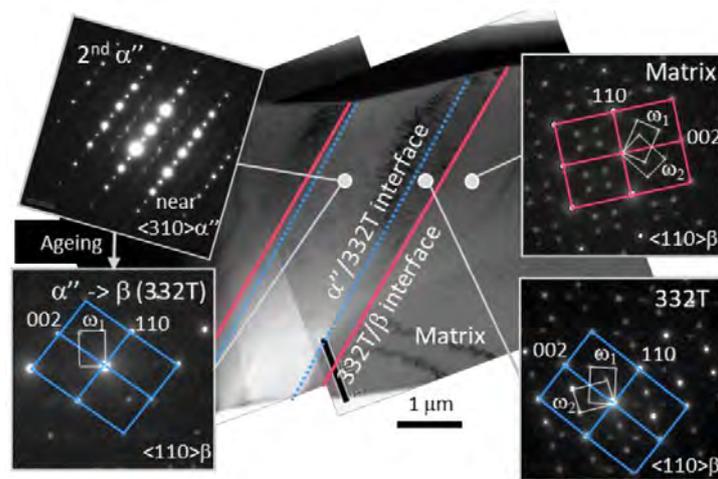


FIGURE 1.16 – Micrographie MET du profil d’une bande de déformation dans l’alliage Ti-10V-4Cr-1Al et clichés de diffraction correspondants (Lilensten *et al.* [2019], Danard [2019]). Les lignes roses représentent l’interface macle-matrice et les lignes bleues l’interface macle- α'' .

tribuent pas la présence de l’ensemble des macles à celle d’ α'' , plutôt en accord avec les tenants d’un maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ intrinsèque à l’instabilité de la phase β . Dans une étude complémentaire, Marteleur [2017] ne s’éloigne pas vraiment du scénario de Sun *et al.* [2013] bien qu’il semble associer pour partie la phase α'' aux interfaces entre macles primaires et matrice (figure 1.15b). Enfin, toujours sur le Ti-12Mo, Cho *et al.* [2020] concluent de mesures in situ par diffraction des neutrons et d’observations EBSD et MET que c’est la réversion de l’ α'' secondaire au sein de l’ α'' primaire qui donne naissance au maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$.

Au contraire, en utilisant les mêmes techniques que Sun *et al.* [2013] sur l’alliage Ti-10V-4Cr-1Al, Lilensten *et al.* [2019] montrent qu’il est probable que le mécanisme dépende fortement de la contrainte locale, et donc de l’environnement (orientation du grain, joint de grains à proximité ...). Ils arrivent même à douter de la validité du mécanisme de réversion suite à l’observation d’une bande d’ α'' bordée de deux macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ (figure 1.16). Cette bande d’ α'' serait alors apparue après la macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ lors du chargement.

L’ensemble de ces études montre donc qu’il n’y a, à ce jour, pas de consensus sur l’origine de l’apparition du mode de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ au sein des alliages de titane β -métastables TRIP/TWIP. Pour dépasser le constat quelque peu pessimiste que les mécanismes dépendent des alliages considérés et des conditions locales, il semble indispensable de développer d’une part de nouveaux outils d’analyse in situ (par ex. Gutierrez-Urrutia *et al.* [2018], Ji *et al.* [2019]), et d’autre part des modèles capables de discriminer les différents scénarios possibles.

1.3 Modélisation microstructurale du maillage mécanique

Nous venons de voir que l’évolution microstructurale dans les alliages de titane TRIP/TWIP est très complexe avec l’occurrence de plusieurs transformations. Plutôt que de développer un modèle tentant de toutes les inclure, au risque de multiplier les interactions et paramètres inconnus, nous avons pris

le parti d'étudier uniquement le maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ en supposant qu'il procède d'un mécanisme direct, c'est-à-dire sans l'intervention dynamique des phases α'' ou ω_s , ni la compétition avec le mode $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$.

Par ailleurs, parce que nous nous intéressons plus particulièrement à la formation des microstructures à l'échelle d'un grain β , illustrées sur la [figure 1.4](#), nous passons en revue dans cette partie les concepts et modèles qui nous paraissent adaptés pour étudier à cette échelle mésoscopique le maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ de la phase β .

1.3.1 Description cinématique du maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$

Dans la mesure où les calculs par la méthode des champs de phase et leur analyse reposent en partie sur la description cinématique du maillage ([Zanzotto \[1996\]](#), [Bhattacharya et al. \[2003\]](#)), nous en présentons ici les éléments nécessaires à la bonne compréhension de son utilisation.

Considérons un milieu initialement non déformé, dont les points matériels ont pour coordonnées $\underline{\mathcal{X}}$. Lorsque ce milieu est déformé, les nouvelles positions des points matériels sont définies par la transformation :

$$\underline{\mathcal{V}}(\underline{\mathcal{X}}) = \underline{\mathcal{X}} + \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}), \quad (1.3)$$

où $\underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$ est le déplacement du point matériel $\underline{\mathcal{X}}$.

Une mesure de la déformation induite par le champ $\underline{\mathcal{V}}(\underline{\mathcal{X}})$ est donnée par le tenseur gradient de transformation $\underline{\mathcal{F}}(\underline{\mathcal{X}})$ défini par :

$$F_{ij} = \frac{\partial \mathcal{V}_i}{\partial \mathcal{X}_j}. \quad (1.4)$$

Considérons à présent deux domaines, A et B , séparés par une interface plane, subissant chacun une déformation homogène $\underline{\mathcal{F}}$ et $\underline{\mathcal{G}}$ respectivement. La transformation est alors affine par morceau :

$$\underline{\mathcal{V}}(\underline{\mathcal{X}}) = \begin{cases} \underline{\mathcal{F}} \cdot \underline{\mathcal{X}} + \underline{c}_1, & \forall \underline{\mathcal{X}} \in A, \\ \underline{\mathcal{G}} \cdot \underline{\mathcal{X}} + \underline{c}_2, & \forall \underline{\mathcal{X}} \in B, \end{cases} \quad (1.5)$$

où \underline{c}_1 et \underline{c}_2 sont des vecteurs constants quelconques, et où $\underline{\mathcal{F}}$ et $\underline{\mathcal{G}}$ sont les tenseurs gradient de transformation dans chacun des domaines déformés. La condition nécessaire et suffisante permettant d'assurer la continuité de $\underline{\mathcal{V}}(\underline{\mathcal{X}})$ à l'interface plane entre A et B , correspondant à la cohérence des réseaux cristallins de A et B , est donnée par :

$$\underline{\mathcal{F}} - \underline{\mathcal{G}} = \underline{a} \otimes \underline{n}, \quad (1.6)$$

où \underline{a} est un vecteur quelconque et \underline{n} le vecteur normal à l'interface entre A et B . L'équation (1.6) est connue sous le nom de condition de saut de Hadamard, ou encore équation de compatibilité cinématique. Géométriquement, elle assure que l'interface est un plan *invariant* dans la mesure où tout vecteur du plan reste parallèle à lui-même par l'application de $\underline{\mathcal{F}}$ ou $\underline{\mathcal{G}}$.

Dans le cas du maillage, on choisit généralement la matrice comme référence pour définir les déformations ([figure 1.17](#)) et l'équation (1.6) s'écrit simplement :

$$\underline{\mathcal{F}} - \underline{\mathbb{I}} = \underline{a} \otimes \underline{n}, \quad (1.7)$$

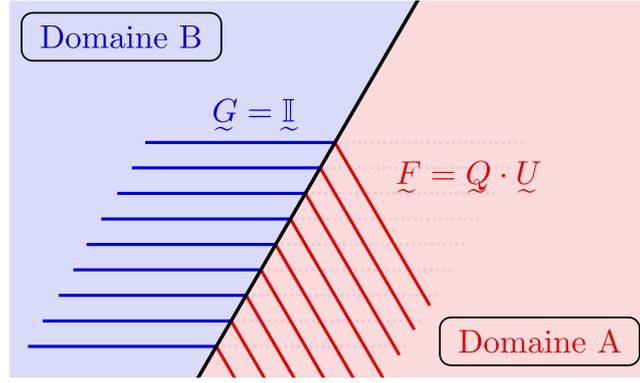


FIGURE 1.17 – Représentation schématique d'un plan invariant (en noir) situé à l'interface d'un domaine maclé A (en rouge) et d'un domaine non déformé B (en bleu).

où \underline{F} correspond au cisaillement décrivant le système de maillage. \underline{a} et \underline{n} sont associés aux éléments du système de maillage. L'équation (1.7) est connue sous le nom d'équation de maillage (*twinning equation*).

En effectuant une décomposition polaire du tenseur \underline{F} en un tenseur \underline{Q} antisymétrique et un tenseur \underline{U} symétrique, l'équation (1.7) se réécrit de la façon suivante :

$$\underline{Q} \cdot \underline{U} - \underline{I} = \underline{a} \otimes \underline{n}. \quad (1.8)$$

Pour un tenseur \underline{U} donné, soit l'équation (1.8) n'a pas de solution, soit elle en admet une paire $(\underline{a}^{(i)}, \underline{n}^{(i)})$ avec $i = 1$ ou 2 correspondant à deux rotations $\underline{Q}^{(i)}$ différentes. On obtient la paire de solutions en cherchant les valeurs propres μ_j du tenseur symétrique de Cauchy-Green droit \underline{C} (Jin et Weng [2002], Bhattacharya *et al.* [2003]), relié à \underline{F} et \underline{U} par :

$$\underline{C} = \underline{F}^T \cdot \underline{F} = \underline{U}^2. \quad (1.9)$$

Pour assurer l'existence d'un plan invariant et respecter l'équation de maillage (1.7), on peut montrer (par ex. Wechsler [1959]) qu'il est nécessaire que les valeurs propres vérifient :

$$\mu_1 \leq 1, \quad \mu_2 = 1, \quad \mu_3 \geq 1. \quad (1.10)$$

Dans ce cas, la paire de solutions $(\underline{a}^{(i)}, \underline{n}^{(i)})$ est donnée par :

$$\underline{a}^{(i)} = \rho \left(\sqrt{\frac{\mu_3(1-\mu_1)}{\mu_3-\mu_1}} \hat{e}_1 + \kappa^{(i)} \sqrt{\frac{\mu_1(\mu_3-1)}{\mu_3-\mu_1}} \hat{e}_3 \right), \quad (1.11)$$

$$\underline{n}^{(i)} = \frac{\sqrt{\mu_3} - \sqrt{\mu_1}}{\rho \sqrt{\mu_3 - \mu_1}} \left(-1 \sqrt{1-\mu_1} \hat{e}_1 + \kappa^{(i)} \sqrt{\mu_3-1} \hat{e}_3 \right), \quad (1.12)$$

où $\kappa^{(1)} = -1$ et $\kappa^{(2)} = 1$, $\rho \neq 0$ est choisi tel que $\|\underline{n}^{(i)}\| = 1$, et \hat{e}_j sont les vecteurs propres de \underline{C} associés aux valeurs propres μ_j . On obtient également les rotations $\underline{Q}^{(i)}$ correspondantes à partir de l'équation (1.8) :

$$\underline{Q}^{(i)} = \left(\underline{I} + \underline{a}^{(i)} \otimes \underline{n}^{(i)} \right) \cdot \underline{U}^{-1}. \quad (1.13)$$

Ainsi, il existe deux gradients de transformation $\tilde{F}^{(i)}$ correspondant à une même déformation \tilde{U} :

$$\tilde{F}^{(1)} = \tilde{Q}^{(1)} \cdot \tilde{U}, \quad (1.14)$$

$$\tilde{F}^{(2)} = \tilde{Q}^{(2)} \cdot \tilde{U}, \quad (1.15)$$

Ils sont donc reliés entre eux par une rotation :

$$\tilde{F}^{(2)} = \tilde{Q} \cdot \tilde{F}^{(1)}, \quad \text{avec} \quad \tilde{Q} = \tilde{Q}^{(2)} \cdot \tilde{Q}^{(1)T}. \quad (1.16)$$

Les modes de maclage correspondant à ces deux gradients de transformation sont conjugués l'un de l'autre. Un variant de macle donné a donc la possibilité de présenter deux plans de composition différents correspondant à deux modes de maclage conjugués.

Dans le cas du maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, le gradient de transformation est construit simplement à partir des éléments du système de maclage. Pour le variant particulier $(332) [11\bar{3}]$, on a en effet :

$$\tilde{F} = \mathbb{I} + \gamma_{tw} \left(\tilde{\eta}_1^{(1)} \otimes \tilde{K}_1^{(1)} \right), \quad (1.17)$$

où $\tilde{\eta}_1^{(1)}$ est le vecteur unitaire dans la direction $[11\bar{3}]$, $\tilde{K}_1^{(1)}$ le vecteur unitaire dans la direction $[332]$, et $\gamma_{tw} = \sqrt{2}/4$ le cisaillement associé à ce mode de maclage (tableau 1.1).

En appliquant la méthodologie décrite ci-dessus, le mode conjugué correspond au cisaillement de même amplitude γ_{tw} mais de direction $\eta_1^{(2)} = [111]$, et au plan de maclage de normale $\underline{K}_1^{(2)} = [11\bar{2}]$. On reconnaît bien le mode conjugué du tableau 1.1.

Dès lors qu'ils sont étudiés dans le cadre de l'élasticité géométriquement non-linéaire, ces deux modes sont équivalents dans la mesure où ils correspondent à une même déformation $\tilde{U} = \sqrt{\tilde{F}^{(1)T} \cdot \tilde{F}^{(1)}} = \sqrt{\tilde{F}^{(2)T} \cdot \tilde{F}^{(2)}}$. Ce point sera de nouveau abordé dans le Chapitre 4.

Cela semble en contradiction avec les observations dans les alliages de titane TRIP/TWIP où le maclage de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ est prédominant, comme nous l'avons vu plus haut (voir Section 1.2.3.3). Il est donc possible que ce qui sélectionne le mode de maclage soit un ingrédient absent de la description cinématique du maclage, et donc de tout modèle basé uniquement sur la minimisation de l'énergie élastique. Le premier de ces ingrédients pourrait être la différence de *shuffle* entre les modes $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ et $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$ (voir figure 1.13). Le second ingrédient est une différence d'énergie de joint de macle, qui pourrait être liée au *shuffle* dans la mesure où elle fait intervenir la configuration atomique dans le joint de macle.

1.3.2 Modélisation champ de phase du maclage mécanique

Dans cette section, nous passons rapidement en revue les travaux utilisant des modèles de champ de phase pour décrire le maclage mécanique, qui ont guidé nos choix dans le développement d'un modèle pour le maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Nous nous limitons à discuter les principales hypothèses et résultats de travaux antérieurs, dans la mesure où nous reviendrons en profondeur sur ces modèles dans les chapitres suivants.

Contrairement aux transformations martensitiques (Artemev *et al.* [2001], Levitas *et al.* [2010], Salman *et al.* [2012a]), le maclage mécanique n'a pas fait l'objet d'un grand nombre d'études par champ de phase. Ce déséquilibre est surprenant dans la mesure où le maclage est formellement similaire aux transformations martensitiques (voir Section 1.3.1) : dans le formalisme champ de phase, il met en jeu les mêmes ingrédients à savoir la compétition entre énergie d'interface et énergie élastique, si l'on ne prend pas en compte de relaxation plastique.

Si l'on excepte les travaux où le maclage est décrit par le passage de dislocations partielles (Hu *et al.* [2010]) limités à des échelles nanométriques et aux matériaux dont la structure cristalline se prête à cette description (typiquement les métaux c.f.c.), la majorité des modèles de champ de phase à l'échelle mésoscopique sont similaires. Ils reposent sur l'introduction de paramètres d'ordre non conservés permettant de discriminer les variants de macle de la matrice, évoluant selon les lois de relaxation où la force motrice est la diminution de l'énergie élastique. Il s'agit donc essentiellement de modèles de type Allen-Cahn (Allen *et Cahn* [1979]) incluant une contribution élastique. L'influence du maclage y est intégrée par des déformations libres associées à chacun des variants de macle. Pour reproduire l'anisotropie de croissance, la plupart des études introduisent une anisotropie des énergies de joint de macle. Cette anisotropie est justifiée qualitativement par la variation de la cohérence de l'interface en fonction de son orientation.

Les premiers travaux mettant en œuvre ce type de modèles sont ceux de Heo *et al.* [2011]. Ces auteurs s'intéressent à la croissance de macles mécaniques $\{111\} \langle 11\bar{2} \rangle$ dans de l'aluminium, de réseau cubique faces centrées. Ils se sont restreints à des configurations 2D, en cherchant à reproduire la croissance de deux variants de macle $\{111\} \langle 11\bar{2} \rangle$ dans leur plan de cisaillement (P) commun. De cette manière, il est facile de vérifier que les orientations des plans de macle sont correctement prédites (voir figure 1.18b-c). Si les résultats qu'ils obtiennent sont conformes à ce qu'on pouvait attendre par la description cinématique (Section 1.3.1), il faut souligner deux points délicats qu'on retrouve très souvent dans les études de ce genre.

En premier lieu, malgré le cisaillement important de $\sqrt{2}/2$ (approx. 70%) accompagnant le maclage, l'élasticité est traitée dans le cadre des petites transformations (ou géométriquement linéaire). En second lieu, l'anisotropie d'énergie d'interface engendre, par construction du modèle, une anisotropie de l'épaisseur des interfaces. Lorsque l'anisotropie d'énergie d'interface est grande (le rapport r entre les valeurs maximale et minimale est fixée à 40 dans cette étude), on observe un étalement excessif de l'interface diffuse dans la direction de croissance. Il faut noter que cet artefact n'est jamais discuté (par ex. Liu *et al.* [2018b]), alors qu'il est susceptible d'impacter les prédictions.

Gu *et al.* [2013] utilisent le même type de modèle pour étudier le maclage du tantale, métal cubique centré. Néanmoins, contrairement à la phase β dans les titanes β -métastables, il macle suivant le mode le plus commun $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$, décrit dans cette étude par un cisaillement d'amplitude $\sqrt{2}/2$ ne nécessitant pas de *shuffle* (voir tableau 1.1). Gu *et al.* [2013] ont calibré leur modèle à l'aide de calculs en dynamique moléculaire utilisant un potentiel développé sur des calculs *Ab initio*. En revanche, ils fixent le rapport entre valeurs maximale et minimale de l'énergie d'interface à 10 en assimilant l'énergie en pointe de macle à une énergie de surface. La prédiction qu'ils font de la croissance d'une macle est en bon accord avec le même type de calcul en dynamique moléculaire, même si encore une fois, on peut noter un étalement très important de l'interface diffuse dans la direction de croissance, visible sur la fi-

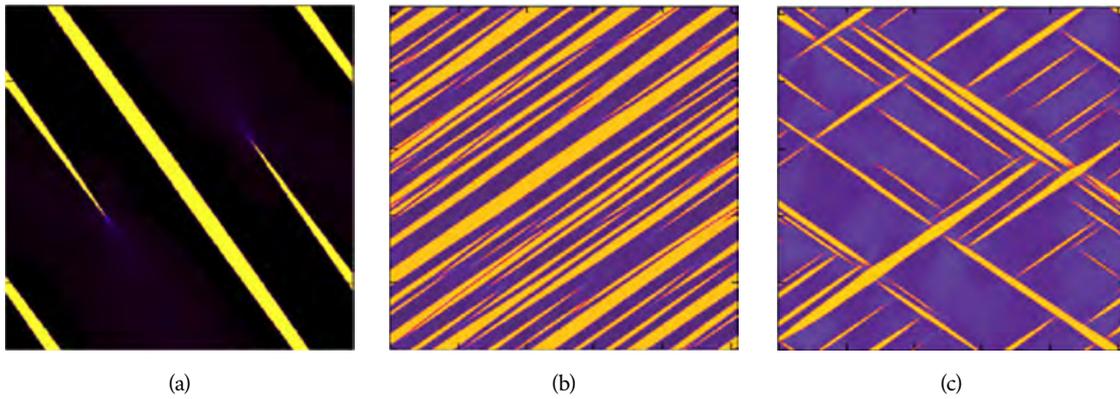


FIGURE 1.18 – Simulations par la méthode des champs de phase de maillage mécanique, présentant la croissance anisotrope de variants de maclé suivant les modes (a) $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ dans le tantale, c.c. (Gu *et al.* [2013]) et (b-c) $\{111\} \langle 11\bar{2} \rangle$ dans l'aluminium, c.f.c. (Heo *et al.* [2011]).

gure 1.18a.

Le modèle proposé par Heo *et al.* [2011] a été utilisé régulièrement pour étudier le maillage dans les matériaux hexagonaux, présentant généralement une susceptibilité plus grande au maillage que les matériaux cubiques. Dans cette veine, on trouve les études de Pi *et al.* [2016], de Liu *et al.* [2018b] et très récemment de Spearot *et al.* [2020].

Comme on l'a vu à plusieurs reprises, les valeurs de cisaillement associées au maillage sont le plus souvent élevées. Or, les travaux de Heo *et al.* [2011] et Gu *et al.* [2013] reposent tous deux sur un formalisme géométriquement linéaire pour exprimer l'énergie élastique. Par analogie avec des études entreprises sur les transformations martensitiques (Finel *et al.* [2010]), on peut douter que ce choix, dicté par des considérations numériques et algorithmiques, permette de rendre compte fidèlement d'évolutions microstructurales plus complexes que celles, triviales, qui sont présentées sur la figure 1.18.

Pour pallier ce problème, Clayton et Knap [2011a] proposent un formalisme d'élasticité géométriquement non-linéaire du maillage mécanique. Dans cet article, les simulations numériques reposent néanmoins sur l'approximation géométriquement linéaire. Dans ce cadre, ils comparent l'évolution d'un variant de maclé dans un mono-cristal de magnésium soumis à différentes sollicitations et conditions aux limites. Ils analysent notamment l'influence de l'anisotropie d'énergie d'interface sur les morphologies : même pour un rapport plus modéré ($r = 2$) que dans Heo *et al.* [2011] et Gu *et al.* [2013], la croissance est favorisée dans la direction de plus forte énergie d'interface. On peut noter qu'en choisissant des énergies d'interface présentant un axe de symétrie d'ordre 2, on brise la symétrie du problème élastique en supprimant le maillage réciproque.

Par la suite, dans une série d'articles dont les résultats sont résumés dans l'article de revue de Clayton [2018], Clayton et Knap [2011b] mettent en œuvre leur formalisme géométriquement non-linéaire par la méthode des éléments finis. Ils se sont intéressés au maillage de monocristaux céramiques (calcite et saphir) lors d'essais de nano-indentation. Ils montrent dans cette étude qu'il est important de travailler dans le cadre géométriquement non-linéaire pour certaines orientations et systèmes de maillage, comme l'illustre la figure 1.19. On remarquera l'étalement des interfaces diffuses, pathologie de ce type

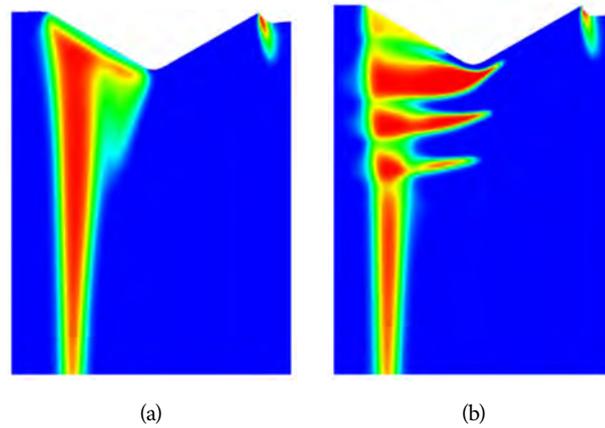


FIGURE 1.19 – Simulation par la méthode des champs de phase de la croissance de macles dans un cristal de calcite soumis à nano-indentation. Utilisation d'un formalisme élastique géométriquement (a) linéaire et (b) non-linéaire (Clayton et Knap [2011b]).

de modèle sur laquelle nous reviendrons au Chapitre 2 (Section 2.3.3). Ils procèdent à une étude similaire autour d'une entaille dans Clayton et Knap [2013], avant d'étendre dans Clayton et Knap [2015] leur modèle afin d'examiner l'interaction entre maclage et endommagement.

En reprenant dans ses grandes lignes le formalisme de Clayton et Knap pour la description du maclage en grandes déformations, Kondo *et al.* [2014], puis Liu *et al.* [2018a] intègrent des modèles de plasticité cristalline. Dans les deux cas, les modèles sont appliqués à des matériaux hexagonaux dans lesquels la compétition entre maclage plasticité peut être complexe. Cependant, il faut noter que ces travaux ne prennent en compte qu'un seul variant de macle, probablement pour alléger les ressources de calcul nécessaires.

Enfin, très récemment, Lafourcade *et al.* [2019] ont appliqué le modèle en chemins de réaction de Denoual *et al.* [2010] (voir aussi Denoual et Vattré [2016]) au maclage d'un cristal moléculaire de 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène (TATB). Ce type de modèle, où le paramètre d'ordre est le tenseur de déformation libre lui-même, fera l'objet d'une courte discussion dans le Chapitre 5.

Terminons cette revue bibliographique sur la problématique du choix des paramètres d'ordre et la construction du paysage d'énergie libre associé, qui est absente des articles traitant du maclage par la méthode des champs de phase. En effet, la majorité des travaux recensés ci-dessus s'intéressent à des matériaux c.f.c. ou h.c. Dès lors, les modes de maclage n'impliquent que des cisaillements, et le lien est direct entre cisaillement et paramètre d'ordre d'un modèle type Allen-Cahn. Ce lien est mis à profit pour déterminer la barrière d'énergie associée à la variation du paramètre d'ordre par des calculs *Ab initio* (Heo *et al.* [2011], Gu *et al.* [2013]), ou de statique moléculaire utilisant des potentiels empiriques (Spearot *et al.* [2020]).

Comme nous l'avons vu dans la Section 1.2.3.3, le maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ (et son mode conjugué) requiert un *shuffle*. L'association du paramètre d'ordre et du cisaillement n'est donc plus aussi immédiate qu'elle l'était dans les travaux cités, et il est nécessaire de savoir qui, d'entre le cisaillement et le *shuffle*, constitue le paramètre d'ordre primaire, c'est-à-dire celui qui contrôle le processus.

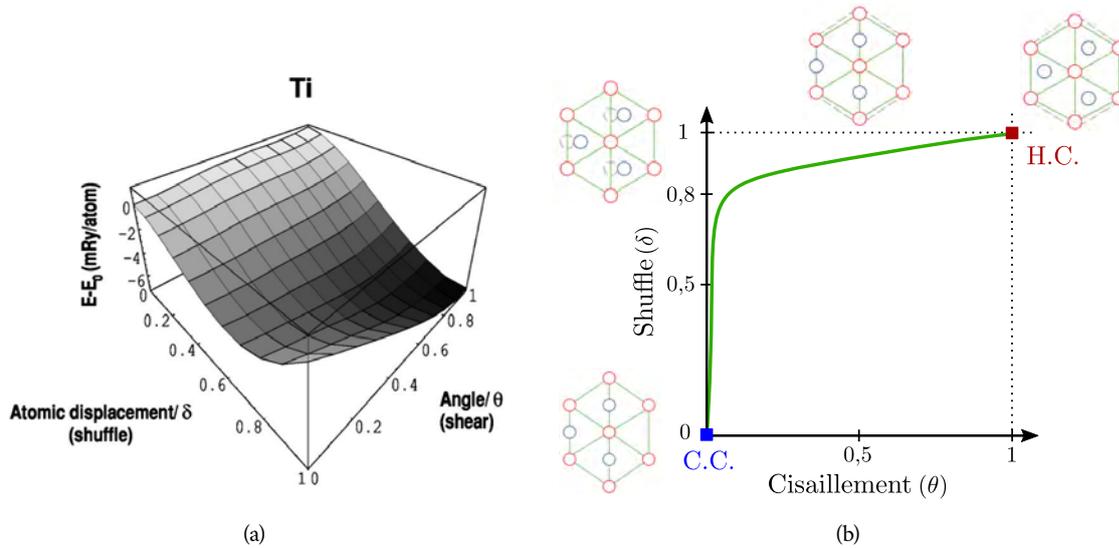


FIGURE 1.20 – Variation d'énergie calculée par méthode Ab initio en fonction du *shuffle* et du cisaillement lors du passage de la phase β (c.c., coordonnées (0,0)) à la phase α (h.c., coordonnées (1,1)) dans du titane pur : (a) Visualisation 3D des valeurs de l'énergie (Sanati *et al.* [2001]), et (b) représentation schématique du chemin $\beta \rightarrow \alpha$ coûtant le moins d'énergie.

On pourrait ainsi penser que le *shuffle* constitue un candidat plausible comme paramètre d'ordre primaire si l'on considère que ce mode de maillage est également une manifestation de l'instabilité intrinsèque de la phase β (Section 1.2.3.3). Ce point est discuté dans la section suivante.

Des éléments de réponse à cette question pourraient être apportés par des calculs de paysage d'énergie à l'échelle atomique, du type de ceux effectués par Sanati *et al.* [2001] dans le titane pur pour la transformation $\beta \rightarrow \alpha$ qui associe également cisaillement et *shuffle* (voir aussi l'étude récente de Feng et Widom [2018]). Sur la figure 1.20b, nous reportons le chemin $\beta \rightarrow \alpha$ identifié (approximativement) comme le chemin de plus grande pente issu du paysage d'énergie calculé par Sanati *et al.* [2001] et reporté sur la figure 1.20a. Ce graphique semble indiquer que la transformation procède d'abord par une étape où seul le *shuffle* évolue, le cisaillement restant faible, ce qui suggère qu'ici le *shuffle* est un paramètre d'ordre primaire et le cisaillement seulement secondaire. Il est d'ailleurs intéressant de mentionner ici que c'est exactement à cette conclusion qu'aboutit une analyse de modèle de Landau adapté à la transformation $\beta \rightarrow \alpha$, car la prise en compte des propriétés de symétrie des deux paramètres d'ordre impliqués dans cette transformation conduit à un terme de couplage dans lequel le *shuffle* apparaît quadratiquement et le cisaillement seulement linéairement⁷. Comme nous le mentionnerons dans la section suivante, ce type de couplage conduit à attribuer un caractère primaire au *shuffle* et seulement secondaire au cisaillement.

Nous voyons donc que la clé de l'identification correcte des caractères primaires ou secondaires qu'il faut attribuer aux paramètres d'ordre nécessite l'identification des termes de couplage qui les relient. C'est cet aspect qui est discuté dans la section suivante.

7. Pour un cisaillement donné, la phase α peut être obtenue dans le cas d'un *shuffle* de même amplitude dans un sens ou dans l'autre, selon la même direction.

1.3.3 Paramètres d'ordre primaires et secondaires

Nous devons ici faire une légère digression sur la notion de paramètre d'ordre primaire et secondaire et, plus précisément, sur ce qui les différencie.

Quand plusieurs paramètres d'ordre interviennent dans la description thermodynamique d'une transition de phase, le (ou les) paramètres d'ordre primaires sont ceux dont la présence seule est suffisante pour que la transition de phase ait lieu. Ils doivent donc, dans le potentiel thermodynamique adéquat, porter les non-linéarités qui génèrent la transition de phase.

Les autres paramètres d'ordre, c'est-à-dire ceux qui ne remplissent pas le critère précédent, ont un statut qui dépend de la nature de leur couplage avec les paramètres d'ordre primaires. Pour préciser ce point, nous allons considérer que le potentiel thermodynamique est écrit sous la forme d'un développement de Landau. Si, dans ce potentiel, le couplage de ces "autres" paramètres d'ordre avec les primaires est, au plus bas ordre, linéaire, alors il est trivial de montrer que ces paramètres d'ordre se comporteront mathématiquement de la même manière que les paramètres d'ordre primaires : à un facteur de proportionnalité près, ils suivent les mêmes lois d'évolution en fonction de la grandeur intensive qui contrôle la transition de phase. Dans cette situation, ces "autres" paramètres d'ordre sont tout aussi primaires que les précédents. Par contre, si le couplage est d'ordre plus élevé, c'est-à-dire si, dans les termes de couplage, la somme des exposants qui apparaissent sur les paramètres d'ordre primaires est supérieure ou égale à deux, les "autres" paramètres d'ordre suivront des lois différentes, génériquement moins singulières : ils ont alors un rôle secondaire, dans la mesure où leur absence de changerait pas la nature de la transition. Ils méritent dans ce cas le qualificatif de "secondaire".

Avant d'appliquer ces considérations à notre problème de maillage, nous souhaitons faire une remarque sur l'importance d'attribuer correctement les rôles de primaire et secondaire aux paramètres d'ordre.

L'incorporation correcte des couplages entre les différents paramètres d'ordre est surtout importante dans les situations où ces paramètres d'ordre sont faibles, ou fluctuent autour de petites valeurs.

Il est donc évidemment crucial d'incorporer les bons couplages quand nous sommes en présence d'une transition du 2nd ordre, situation dans laquelle les fluctuations des paramètres d'ordre peuvent être associées à une longueur de corrélation qui diverge : elles deviennent alors critiques. Dans cette situation, une modification du couplage entre les différents paramètres d'ordre peut tout simplement supprimer ces fluctuations et donner à la transition de phase un caractère de 1^{er} ordre.

Les phénomènes de nucléation que l'on observe quand nous avons des transitions du 1^{er} ordre peuvent également être très perturbés par un couplage non adapté, dans la mesure où souvent les germes critiques sont de petites tailles et correspondent donc à des zones dans lesquelles les paramètres d'ordre atteignent des valeurs finies, mais faibles.

Enfin, et toujours pour les mêmes raisons, à savoir le passage par un régime où les paramètres d'ordre sont faibles, les phénomènes où une phase peut apparaître par un mécanisme d'instabilité seront également très perturbés, voire supprimés, par un couplage non adapté.

Nous passons maintenant à la situation traitée dans ce mémoire, c'est-à-dire le maillage mécanique. Le tenseur de déformation libre constitue évidemment un premier jeu de paramètre d'ordre. Dans les situations où le maillage ne nécessite pas de *shuffle* (par ex $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ dans les métaux c.c.), il est évident que ces paramètres d'ordre seront primaires. La formulation thermodynamique la plus naturelle est alors d'écrire une élasticité non-linéaire, dans la veine de ce qui a été proposé pour les transformations martensitiques thermo-élastiques (par ex. Barsch et Krumhansl [1984], Finel *et al.* [2010]). Cela étant, en raison de la souplesse que cela apporte (par exemple pour calibrer des énergies d'interface), nous pouvons également envisager un autre paramètre d'ordre, scalaire cette fois-ci, sur lequel reposera la non-linéarité du potentiel thermodynamique, et ne faire intervenir le tenseur de déformation libre qu'au travers d'un potentiel élastique quadratique. Cependant, puisqu'en un point où le cisaillement est non nul, le paramètre d'ordre artificiel envisagé ne peut prendre qu'une seule valeur, il est clair que, au plus bas ordre, le couplage entre le tenseur de déformation libre et le paramètre d'ordre scalaire sera linéaire. Nous serons alors dans une situation où les deux paramètres d'ordre, le champ scalaire et le tenseur de déformation libre, sont simultanément primaires.

Enfin, dans les situations où le maillage est accompagné de *shuffle*, comme ici les macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, nous avons d'emblée deux paramètres d'ordre, le *shuffle* et le tenseur de déformation libre. Comme ci-dessus et pour la même raison évoquée, il est évident que leur couplage doit être, au plus bas ordre, linéaire. Ces deux paramètres d'ordre seront donc tous les deux primaires, quelque soit celui sur lequel on fera porter la non-linéarité associée à la transition de phase.

En conclusion, dans les situations de maillage, le tenseur de déformation libre joue toujours un rôle primaire, que le maillage soit accompagné d'un *shuffle* ou non, et, si ce dernier est nécessaire, il sera également primaire.

Dans les premières simulations présentées ci-dessous, nous utiliserons donc une formulation où le *shuffle* et le tenseur de déformation libre sont couplés linéairement. Nous rencontrerons cependant des problèmes quantitatifs dont nous souhaitons discuter dès maintenant. Précisons d'abord que nous ferons porter la non-linéarité de la densité d'énergie par le paramètre d'ordre φ associé au *shuffle* au travers d'un potentiel double-puits. En conséquence, et cela est inévitable, le couplage linéaire entre tenseur de déformation libre et *shuffle* générera sur φ , au cœur de la matrice et des macles, des décalages par rapport aux valeurs qu'il atteindrait en l'absence de couplage élastique. Cet effet, tout à fait recevable d'un point de vue physique, dépend essentiellement de la courbure du potentiel au fond des puits et de l'amplitude des interactions élastiques. Nous utiliserons ici un potentiel de type $\varphi^2 - \varphi^4$. Les courbures au fond des puits sont donc comparables, en amplitude, à celle présente au maximum du potentiel et, en tout état de cause, assez faibles. En conséquence, et bien qu'ils soient en principe recevables, les décalages mentionnés ci-dessus ne sont pas réellement contrôlés et s'avéreront être trop

importants. De même, et pour les mêmes raisons, le profil du champ φ au travers des interfaces macle-matrice sera fortement perturbé pour le couplage élastique.

De manière à remédier à ces artefacts, nous avons choisi, dans un second temps, de remplacer le couplage linéaire entre φ et le tenseur de déformation libre par un couplage où φ est remplacé par une fonction $h(\varphi)$ non-linéaire, plus précisément un polynôme de degré 5 (voir [Section 2.3.3](#)). Nous avons bien conscience que cela perturbe significativement le caractère primaire partagé initialement par les deux paramètres d'ordre. Cela étant, cette modification, qui corrige les deux artefacts mentionnés plus haut, ne devrait pas trop perturber les étapes de croissance de macles déjà présentes, car ces étapes ne sont associées ni à des fluctuations critiques, ni à de la nucléation et ni à un mécanisme d'instabilité.

Enfin, et afin d'être capable d'observer l'apparition de macles par un mécanisme d'instabilité, nous utiliserons aussi un 3^{ème} couplage, également non-linéaire, mais d'ordre plus faible que le précédent. En effet, nous montrerons qu'un polynôme $h(\varphi)$ de degré 5 interdit tout mécanisme d'instabilité, tandis qu'un polynôme d'ordre 3 le permet (voir [Section 4.4](#)).

Nous terminons cette digression (finalement assez longue ...) par une dernière remarque. En toute rigueur, nous aurions dû nous contenter d'une théorie où le couplage entre les paramètres d'ordre est linéaire. Cette théorie, pour être complète et intégrer tous les phénomènes, devrait cependant contenir des fluctuations, c'est-à-dire des termes de bruit. Idéalement, une telle théorie devrait être issue d'une procédure de changement d'échelle appliquée sur un modèle écrit à l'échelle atomique, d'ordre deux en temps ou d'ordre un seulement, mais stochastique. Le modèle mésoscopique obtenu contiendrait inévitablement des termes de bruit, qui pourraient donc être l'ingrédient dont on a besoin pour déclencher *par nucléation* l'apparition de macles au sein de la matrice, sans avoir recours à un mécanisme d'instabilité pure. De même, il est probable qu'à l'issue du changement d'échelle, nous obtenions une fonction double-puits qui s'écarte significativement d'un simple potentiel en $\varphi^2 - \varphi^4$ et qui serait caractérisée par des courbures aux minima beaucoup plus fortes qu'au niveau du point col (voir par ex. [Bronchart et al. \[2008\]](#)). Cela pourrait donc générer des interfaces avec un profil beaucoup plus local que celui obtenu avec le potentiel $\varphi^2 - \varphi^4$, sans avoir recours à une fonction $h(\varphi)$ d'ordre élevé. Sur ce dernier point, il faut d'ailleurs noter que, si la procédure de changement d'échelle est bien menée, le modèle d'énergie libre mésoscopique issu de la procédure devrait, au plus bas ordre, contenir un terme de couplage linéaire, dans la mesure bien entendu où le modèle initial, à l'échelle atomique, contiendra évidemment un couplage lui-même linéaire. Le modèle "coarse-grainé" générerait donc également un décalage de φ dans le cœur de la matrice et des macles, mais, comme nous l'avons déjà écrit plus haut, ce décalage a véritablement une réalité physique.

La démarche par changement d'échelle évoquée ci-dessus est en soi une étude complète. Ici, nous suivrons la voie phénoménologique utilisée classiquement dans le domaine des méthodes de champ de phase, et qui consiste à postuler les fonctionnelles d'énergie dont on a besoin, en ayant le souci de proposer les formes les plus simples compatibles avec les phénomènes que l'on souhaite incorporer.

CHAPITRE

2

MODÈLE CHAMP DE PHASE DE CROISSANCE DE MACLES MÉCANIQUES DANS LE CADRE GÉOMÉTRIQUEMENT LINÉAIRE

Sommaire

1.1 Généralités sur le titane et ses alliages	6
1.1.1 Le titane pur	6
1.1.2 Les alliages de titane	7
1.1.3 Utilisation des alliages de titane β -métastables	9
1.2 Mécanismes à l'origine du comportement mécanique des alliages de titane TRIP/TWIP	10
1.2.1 Glissement cristallographique	11
1.2.2 Transformations de phase sous contrainte	12
1.2.3 Maclage mécanique	16
1.3 Modélisation microstructurale du maclage mécanique	23
1.3.1 Description cinématique du maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$	24
1.3.2 Modélisation champ de phase du maclage mécanique	26
1.3.3 Paramètres d'ordre primaires et secondaires	31

Dans ce chapitre, on commence par introduire le formalisme champ de phase qui a été utilisé dans le cadre de cette thèse (Section 2.1). Le cadre géométriquement linéaire pour l'élasticité (formalisme petites déformations) associée au maillage mécanique, considéré comme une transformation purement displacive, est présenté dans ce chapitre (Section 2.2). Un modèle champ de phase de type Allen-Cahn (Allen et Cahn [1979]) avec prise en compte de l'élasticité dans le cadre des petites déformations est développé (Section 2.2). Des résultats préliminaires sont alors discutés, en insistant sur l'influence de l'élasticité sur le contrôle de l'interface macle-matrice générée par le modèle champ de phase (Section 2.3). On s'intéresse également à la prise en compte d'une énergie d'interface anisotrope à la façon de Heo *et al.* [2011] dans le but d'obtenir des morphologies anisotropes proches de celles observées expérimentalement (Section 2.4.2). Ce modèle a cependant l'inconvénient de générer une largeur d'interface anisotrope. Pour éviter cela, on propose un modèle champ de phase capable de générer une énergie d'interface anisotrope avec largeur d'interface constante (Section 2.4.3). Enfin, on s'intéresse au rôle de l'anisotropie de l'énergie élastique induite par le tenseur de déformation libre associé au système de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ sur la croissance d'un variant de macle (Section 2.4.4).

2.1 Formalisme champ de phase

L'étude de l'évolution des microstructures au sein des matériaux solides soumis à divers types de chargements, qu'ils soient mécaniques, thermiques, électriques, magnétiques ... permet de mieux comprendre les phénomènes physiques à l'origine de leur comportement. Du point de vue de l'expérimentation numérique, la modélisation des phénomènes physiques à l'origine des évolutions microstructurales permet de valider les théories et hypothèses choisies, pour au final être capable de prévoir le comportement des matériaux dans des cas de chargements non expérimentés, voire trop coûteux à réaliser de manière systématique.

À l'échelle mésoscopique, une méthode éprouvée permettant l'étude de l'évolution des microstructures est la méthode champ de phase (voir par exemple Moelans *et al.* [2008]). L'intérêt principal de cette méthode est d'être capable de lier différents phénomènes physiques dans un cadre thermodynamique consistant, sans présumer des morphologies ou de la distribution des différents constituants de la microstructure. Différentes forces motrices agissant sur l'évolution de la microstructure peuvent ainsi être prises en compte : forces motrices liées, par exemple, à des phénomènes d'origine mécanique, électrique, magnétique, ou à des processus de transport tels que la diffusion de masse ou de chaleur.

La méthode champ de phase se base sur l'introduction de divers variables que l'on nomme champs de phase. Ces champs peuvent être considérés comme conservatifs (régis par des équations de conservation, par exemple dans le cas de l'étude de phénomènes de diffusion) ou non-conservatifs (paramètres d'ordre, aimantation, par exemple). Ils représentent localement la microstructure étudiée. L'évolution temporelle de la microstructure est ainsi déduite de l'évolution temporelle de ces champs de phase. Dans le cas de l'étude du maillage mécanique, on s'intéresse à des champs scalaires non-conservatifs, que l'on nommera $\varphi_i(\underline{x}, t)$, i représentant le numéro du champ considéré, \underline{x} le vecteur position et t le temps. Ces champs sont associés à la présence d'un variant de macle de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ et sont alors

définis de la façon suivante :

$$\varphi^{(i)}(\underline{\mathcal{X}}, t) = \begin{cases} 0 & \text{à l'intérieur de la matrice,} \\ 1 & \text{à l'intérieur du variant de macle } i. \end{cases} \quad (2.1)$$

Le milieu non maclé sera appelé “matrice” dans le reste de cette étude. Il représente le matériau titane β -métastable à l'état c.c. initial, c.-à-d. n'ayant pas subi de maclage mécanique.

Dans le cas de l'étude d'une microstructure biphasée macle-matrice, un seul champ $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ peut être utilisé pour décrire l'état de la microstructure. Celle-ci possède une énergie hors d'équilibre \mathcal{F} dépendant du champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$. Cette énergie peut alors être décomposée en deux termes énergétiques : l'un lié à la présence d'interfaces diffuses entre les macles et la matrice, que l'on nomme \mathcal{F}_{int} , et l'autre lié aux déformations induites par la présence du variant de macle, à savoir l'énergie élastique associée à la présence de la macle, nommée \mathcal{F}_{el} .

Dans cette section, on ne s'intéresse qu'au terme \mathcal{F}_{int} . Il s'agit alors d'écrire un modèle de type Allen-Cahn (Allen et Cahn [1979]) en considérant le seul champ de phase noté $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$. Pour une configuration spatiale Ω de la microstructure à un instant t donné, \mathcal{F}_{int} , dans sa formulation la plus simple, s'exprime comme l'intégrale sur Ω de la somme d'un polynôme de type Landau d'ordre 4 respectant les symétries du système et d'un terme en gradient de $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$. Le polynôme d'ordre 4, nommé $g(\varphi)$, traduit la coexistence d'une macle et de la matrice c.c. initiale. Le terme de gradient permet, quant à lui, de pénaliser la présence d'une interface. On peut alors écrire l'expression suivante :

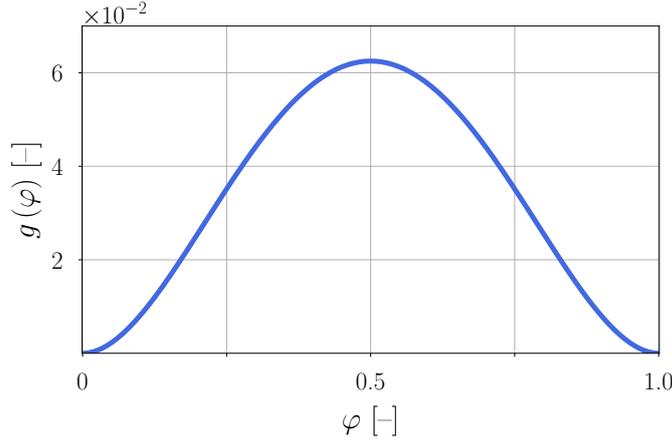
$$\mathcal{F}_{int} = \int_{\Omega} f_{int} dV = \int_{\Omega} \left[W g(\varphi) + \frac{\alpha}{2} |\nabla \varphi|^2 \right] dV, \quad (2.2)$$

où f_{int} est la densité d'énergie correspondante et $g(\varphi)$ une fonction ayant la forme d'un double-puits. Le choix le plus simple est une fonction normalisée telle que $g(\varphi = 0) = 0$ et $g(\varphi = 1) = 0$, qui s'écrit de la manière suivante :

$$g(\varphi) = \varphi^2 (1 - \varphi)^2. \quad (2.3)$$

Une représentation graphique de cette fonction est montrée sur la figure 2.1. Le paramètre W est une densité d'énergie qui contrôle la hauteur de la barrière d'énergie à franchir pour passer d'un état non-maclé ($\varphi = 0$) à un état maclé ($\varphi = 1$). Le paramètre α est le préfacteur du terme en gradient de φ . L'association des paramètres W et α permet de contrôler l'épaisseur et l'énergie d'interface séparant ces deux états. Il faut noter que d'autres façons d'exprimer le terme \mathcal{F}_{int} sont possibles. Notamment, on peut retrouver dans la littérature (Shanthraj et al. [2016], Liu et al. [2018a]) des fonctions $g(\varphi)$ de type double-obstacle en lieu et place de la fonction double-puits que l'on retrouvera dans l'ensemble de cette thèse.

La suite de cette section s'intéresse au profil de φ à travers l'interface diffuse d'un système à l'équilibre, ainsi qu'à l'énergie qui lui est associée. Ces calculs préliminaires sont nécessaires au choix convenable des paramètres numériques des modèles champ de phase considérés au cours de cette thèse.


 FIGURE 2.1 – Fonction double-puits $g(\varphi)$.

2.1.1 Profil d'un champ de phase à l'équilibre

On considère à présent une microstructure biphasée à l'équilibre dont l'énergie totale \mathcal{F} contrôlée par un champ non-conservé $\varphi(\underline{\mathcal{X}}) \in [0, 1]$ n'est composée que du terme \mathcal{F}_{int} , c.-à-d. :

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_{int} = \int_{\Omega} f_{int} dV = \int_{\Omega} \left[W g(\varphi) + \frac{\alpha}{2} |\nabla\varphi|^2 \right] dV. \quad (2.4)$$

On cherche à déterminer la forme du profil du champ $\varphi(\underline{\mathcal{X}})$ à l'équilibre le long d'une direction perpendiculaire à une interface plane. En considérant l'équation (2.4), la condition d'équilibre peut s'écrire :

$$\delta F = \delta \int_{\Omega} \left[W g(\varphi) + \frac{\alpha}{2} |\nabla\varphi|^2 \right] dV = 0. \quad (2.5)$$

En utilisant l'équation d'Euler-Lagrange, on obtient :

$$\frac{\partial f_{int}}{\partial \varphi} - \frac{d}{dx_i} \left[\frac{\partial f_{int}}{\partial (\nabla\varphi)_i} \right] = 0, \quad (2.6)$$

où les termes avec indices répétés sont sommés (convention d'Einstein). Après calcul, l'équation (2.6) conduit à :

$$W g'(\varphi) - \alpha \Delta\varphi(\underline{\mathcal{X}}) = 0. \quad (2.7)$$

On considère que l'interface plane est perpendiculaire à la direction \underline{X} , relative à la coordonnée x_1 . En multipliant l'équation (2.7) par $\frac{d\varphi}{dx_1}$ et en notant que $\frac{d\varphi}{dx_1} \frac{d^2\varphi}{dx_1^2} = \frac{1}{2} \frac{d}{dx_1} \left(\frac{d\varphi}{dx_1} \right)^2$, on obtient :

$$W \frac{dg(\varphi)}{dx_1} = \frac{\alpha}{2} \frac{d}{dx_1} \left(\frac{d\varphi}{dx_1} \right)^2. \quad (2.8)$$

On considère un profil $\varphi(x_1)$ passant de 0 à 1 (c.-à-d. d'une phase à une autre), correspondant aux conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned} \varphi(x_1 = -\infty) &= 0, & \frac{d\varphi}{dx_1}(x_1 = -\infty) &= 0, \\ \varphi(x_1 = +\infty) &= 1, & \frac{d\varphi}{dx_1}(x_1 = +\infty) &= 0. \end{aligned} \quad (2.9)$$

L'équation (2.8) est ensuite intégrée de $-\infty$ à x le long de \underline{X} . Avec $g(\varphi) = \varphi^2(1-\varphi)^2$, on obtient :

$$\frac{d\varphi}{dx_1} = \sqrt{\frac{2W}{\alpha}} \varphi(1-\varphi). \quad (2.10)$$

Dans l'équation (2.10), le préfacteur du terme de droite est l'inverse d'une longueur. Nous introduisons donc une longueur caractéristique δ de la manière suivante :

$$\delta = 4 \sqrt{\frac{\alpha}{2W}}. \quad (2.11)$$

L'expression (2.11) de δ permet de réécrire l'équation (2.10) sous la forme suivante :

$$\frac{d\varphi}{\varphi(1-\varphi)} = 4 \frac{dx_1}{\delta}. \quad (2.12)$$

Le profil $\varphi(x_1)$ est considéré centré en $x_1 = 0$, c'est-à-dire que $\varphi(x_1 = 0) = 0,5$. En utilisant le changement de variable $\psi = \frac{\varphi}{1-\varphi}$ dans l'équation (2.12) et après intégration, on obtient :

$$\varphi(x_1) = \frac{\exp\left(\frac{4x_1}{\delta}\right)}{1 + \exp\left(\frac{4x_1}{\delta}\right)}. \quad (2.13)$$

Cette expression peut ensuite être écrite sous une forme que l'on retrouve plus fréquemment :

$$\varphi(x_1) = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{2x_1}{\delta}\right) \right]. \quad (2.14)$$

On note que le choix de l'expression de δ en (2.11) nous permet d'avoir la propriété suivante :

$$\begin{aligned} \varphi(x_1 = \delta) &\approx 0,98, \\ \varphi(x_1 = -\delta) &\approx 0,02, \end{aligned} \quad (2.15)$$

et donc d'estimer la largeur d'interface à 2δ . On illustre sur la figure 2.2 le profil en tangente hyperbolique.

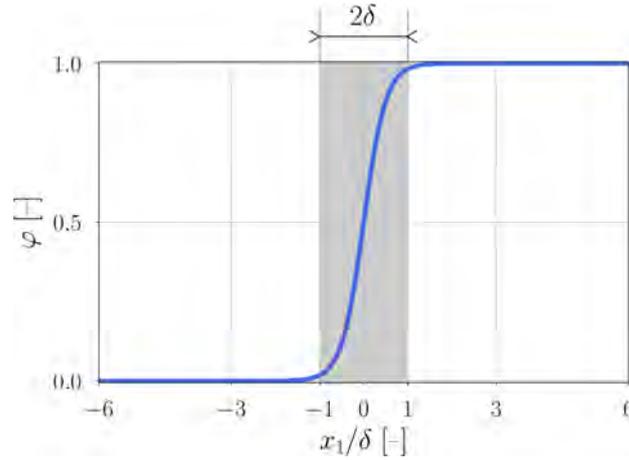
2.1.2 Énergie d'interface

L'énergie d'interface représente l'excès d'énergie associé à la présence de l'interface diffuse. On s'intéresse à la valeur de cette énergie, nommée γ , dans le cas d'une microstructure à l'équilibre d'énergie libre totale $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{int}$. Cette valeur peut être obtenue en intégrant la densité d'énergie d'interface f_{int} le long d'un profil à l'équilibre suivant la direction \underline{X} :

$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{int} dx_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[W g(\varphi) + \frac{\alpha}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx_1} \right)^2 \right] dx_1. \quad (2.16)$$

Or, à l'équilibre, on peut déduire de l'intégration de l'équation (2.8) :

$$W g(\varphi) = \frac{\alpha}{2} \left(\frac{d\varphi}{dx_1} \right)^2. \quad (2.17)$$


 FIGURE 2.2 – Profil en tangente hyperbolique centré en 0. En gris, l'interface de largeur 2δ .

En injectant l'équation (2.17) dans l'équation (2.16) et en intégrant cette dernière par rapport à φ , on obtient l'expression de l'énergie d'interface γ :

$$\gamma = \int_0^1 \alpha \frac{d\varphi}{dx_1} d\varphi. \quad (2.18)$$

On utilise alors l'équation (2.10) pour déterminer la valeur de l'énergie d'interface. On obtient :

$$\gamma = \frac{1}{6} \sqrt{2W\alpha}. \quad (2.19)$$

On rappelle que cette valeur est obtenue dans le cadre d'un système possédant une énergie libre totale $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{int}$ et dans le cas où la fonction double-puits $g(\varphi)$ est exprimée suivant l'équation (2.3).

On remarque qu'il est également possible d'exprimer la densité d'énergie d'interface f_{int} , initialement fonction des paramètres W et α , comme une fonction des paramètres δ et γ . En utilisant les équations (2.11) et (2.19), on trouve $W = 12 \frac{\gamma}{\delta}$ et $\alpha = \frac{3}{2} \delta \gamma$, ce qui donne :

$$f_{int} = 12 \frac{\gamma}{\delta} g(\varphi) + \frac{3}{2} \delta \gamma |\nabla\varphi|^2. \quad (2.20)$$

Cette forme de la densité d'énergie d'interface f_{int} sera utilisée dans la Section 2.4.3.

2.1.3 Loi d'évolution : modèle champ de phase de type Allen-Cahn

Dans cette section, on s'intéresse à l'évolution temporelle du champ de phase $\varphi(\underline{X}, t)$ discriminant les deux états d'une microstructure biphasée. Ce champ est non-conservatif et défini de la même manière que dans l'équation (2.1). L'énergie libre totale \mathcal{F} associée à la microstructure étudiée est donnée par l'équation (2.4). On considère un système fermé, sans échange de chaleur ni de matière avec l'extérieur, à température T constante et positive. En appliquant le second principe de la thermodynamique, on écrit :

$$\frac{dS_{int}}{dt} = \dot{S}_i, \quad \text{avec} \quad \dot{S}_i \geq 0. \quad (2.21)$$

\dot{S}_i représente le taux de production d'entropie par l'ensemble des processus se déroulant à l'intérieur du système. À partir de la différentielle de l'énergie libre $d\mathcal{F} = dU - d(TS)$ (avec U l'énergie interne du

système) et des hypothèses mentionnées précédemment (système fermé, T constante), on peut écrire la relation suivante :

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \mathcal{P}_{ext} - T\dot{S}_i. \quad (2.22)$$

avec \mathcal{P}_{ext} la puissance des efforts extérieurs et $T\dot{S}_i$ la puissance dissipée.

Or, en considérant l'équation (2.4), on peut également écrire :

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \int_{\Omega} \left[W \frac{\partial g(\varphi)}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \alpha \nabla \varphi \cdot \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right] dV. \quad (2.23)$$

L'équation (2.23) peut alors être réécrite en utilisant la relation suivante :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \nabla \varphi \right) = \nabla \varphi \cdot \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} \nabla \cdot \nabla \varphi, \quad (2.24)$$

et le théorème de la divergence :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \nabla \varphi \right) dV = \int_{\delta\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \nabla \varphi \cdot \underline{n} dS. \quad (2.25)$$

On obtient alors :

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \int_{\delta\Omega} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \nabla \varphi \cdot \underline{n} \right) dS + \int_{\Omega} \left[W g'(\varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \alpha \frac{\partial \varphi}{\partial t} \Delta \varphi \right] dV. \quad (2.26)$$

avec $\delta\Omega$ le bord du domaine Ω considéré et \underline{n} la normale à $\delta\Omega$. On peut dès lors discriminer les variations associées aux échanges sur la frontière (liées à la puissance des efforts extérieurs \mathcal{P}_{ext}) de la puissance dissipée $T\dot{S}_{int}$ associée aux processus internes. À partir de l'équation (2.21), on peut alors écrire :

$$\int_{\Omega} \left[-W g'(\varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \alpha \frac{\partial \varphi}{\partial t} \Delta \varphi \right] dV \geq 0. \quad (2.27)$$

Localement, la puissance dissipée respecte l'inégalité suivante :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} [-W g'(\varphi) + \alpha \Delta \varphi] \geq 0. \quad (2.28)$$

Finalement, on observe que l'inégalité (2.28) est automatiquement vérifiée si on postule que l'évolution temporelle du champ de phase $\varphi(\underline{X}, t)$ est donnée par :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -L [W g'(\varphi) - \alpha \Delta \varphi], \quad \text{avec} \quad L > 0, \quad (2.29)$$

où L est un coefficient cinétique (aussi appelé mobilité, en $\text{m}^3/\text{J}/\text{s}$) associé au temps caractéristique de la transformation étudiée. On remarque que la relation obtenue peut finalement être écrite comme une relation de proportionnalité entre la variation temporelle du champ $\varphi(\underline{X}, t)$ et la dérivée fonctionnelle de l'énergie libre \mathcal{F} par rapport à $\varphi(\underline{X}, t)$. En effet, en utilisant l'équation (2.7), on identifie la relation suivante :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -L \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi}, \quad \text{avec} \quad L > 0. \quad (2.30)$$

Cette équation est connue sous le nom d'équation d'Allen-Cahn, ou encore d'équation *Time-Dependent Ginzburg-Landau* (TDGL). La résolution de cette équation différentielle permet de suivre l'évolution temporelle de la microstructure considérée. L'équation (2.30) est l'expression la plus simple reliant une

variation temporelle d'un champ à une force motrice thermodynamique. Dans le cas présenté, la seule force motrice est celle qui cherche à minimiser f_{int} dans le système, c'est-à-dire qui pousse la quantité d'interface à diminuer.

Il faut souligner qu'il est aisé d'étudier l'évolution du champ de phase sous l'effet de termes énergétiques supplémentaires. En effet, comme introduit dans ce chapitre, différentes forces motrices peuvent à la fois être prises en compte en considérant un même champ de phase. Afin de simuler l'évolution de variants de macle mécanique au sein d'une microstructure, on s'intéresse dans la suite de ce chapitre à une force motrice supplémentaire de type mécanique.

2.2 Modèle champ de phase de type Allen-Cahn couplé à l'élasticité : cadre géométriquement linéaire

Nous avons expliqué plus haut (voir Section 1.3.3) que, même en présence de *shuffle*, le tenseur de déformation libre associé au maclage jouait un rôle de paramètre d'ordre primaire, au même titre que le paramètre d'ordre associé au *shuffle*. Nous nous situons donc dans ce cadre. Le paramètre d'ordre φ , qui mesure l'amplitude des *shuffles*, sera associé à un potentiel $g(\varphi)$ non-linéaire et suivra une dynamique dissipative de type Allen-Cahn. L'élasticité quant à elle est introduite sous la forme d'un potentiel élastique quadratique dans lequel la déformation libre est couplée linéairement au paramètre d'ordre φ du *shuffle*.

De la même façon que Clayton et Knap [2011a], Heo *et al.* [2011] ou encore Gu *et al.* [2013], on considère donc un potentiel élastique quadratique en tenseur des déformations élastiques, noté ξ^e . En notant \underline{u} le vecteur déplacement, le tenseur des déformations totales $\underline{\xi}$ linéarisé est donné par :

$$\underline{\xi}(\underline{u}) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{X}} + \left(\frac{\partial \underline{u}}{\partial \underline{X}} \right)^T \right]. \quad (2.31)$$

Ce tenseur est ensuite décomposé additivement en une partie élastique, ξ^e , et une partie inélastique, notée ξ^* :

$$\xi^e = \xi - \xi^*. \quad (2.32)$$

On peut ainsi définir le potentiel élastique qu'il faudra incorporer dans le modèle champ de phase :

$$\mathcal{F}_{el} = \int_{\Omega} f_{el} dV = \int_{\Omega} \frac{1}{2} (\xi - \xi^*) : \underline{\lambda} : (\xi - \xi^*) dV, \quad (2.33)$$

où $\underline{\lambda}$ est le tenseur des constantes élastiques. Le tenseur des contraintes locales $\underline{\sigma}$ est donc relié aux déformations élastiques par la loi de Hooke :

$$\underline{\sigma} = \underline{\lambda} : (\xi - \xi^*). \quad (2.34)$$

En présence de contraintes appliquées $\underline{\sigma}^{app}$, la densité d'énergie élastique à considérer s'écrit :

$$f_{el} = \frac{1}{2} (\xi - \xi^*) : \underline{\lambda} : (\xi - \xi^*) - \underline{\sigma}^{app} : \langle \underline{\xi} \rangle, \quad (2.35)$$

où l'on retranche le terme $\sigma^{\text{app}} : \langle \underline{\varepsilon} \rangle$ relatif à la densité d'énergie apportée au système.

Le tenseur des déformations inélastiques $\underline{\varepsilon}^*$, ou tenseur de déformation libre, est associé au cisaillement pour produire une macle mécanique de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Le tenseur $\underline{\varepsilon}^*$ est alors fonction du champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$, qui rend compte de la présence d'une macle au sein de la microstructure. Le cisaillement relatif à une macle mécanique dépend du variant de macle considéré repéré par l'indice i , et sera noté $\underline{\varepsilon}^{0(i)}$ (voir [Annexe B](#)). On considérera autant de champs de phase $\varphi^{(i)}$ que de variants de macle pris en compte dans le modèle champ de phase. On note respectivement $\underline{\eta}_1^{(i)}$ et $\underline{K}_1^{(i)}$ la direction de cisaillement (ou direction de maclage, c.-à-d. $\langle 11\bar{3} \rangle$) et la direction normale au plan de maclage (c.-à-d. $\{332\}$) liées au variant de macle i . En considérant seulement le variant de macle 1, c.-à-d. $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, associé à un champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$, on introduit, pour des raisons expliquées plus haut (voir [Section 1.3.3](#)), une relation linéaire entre $\underline{\varepsilon}^*$ et $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$, comme [Heo et al. \[2011\]](#) :

$$\underline{\varepsilon}^*(\varphi) = \varphi(\underline{\mathcal{X}}, t) \underline{\varepsilon}^{0(1)}, \quad \text{et} \quad \underline{\varepsilon}^{0(1)} = \frac{\gamma_{tw}}{2} \left(\tilde{\underline{\eta}}_1^{(1)} \otimes \tilde{\underline{K}}_1^{(1)} + \tilde{\underline{K}}_1^{(1)} \otimes \tilde{\underline{\eta}}_1^{(1)} \right), \quad (2.36)$$

où $\gamma_{tw} = \sqrt{2}/4$ est la valeur caractéristique du cisaillement associé au mode de maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ (voir [Section 1.2.3.2](#)), $\tilde{\underline{\eta}}_1^{(1)}$ est le vecteur unitaire dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\tilde{\underline{K}}_1^{(1)}$ le vecteur unitaire dans la direction $\underline{K}_1^{(1)}$. Le tenseur $\underline{\varepsilon}^{0(1)}$ est construit dans le cadre géométriquement linéaire (relation (2.31)) à partir du gradient de déplacement intrinsèque au mode de maclage $\nabla \underline{u}^{0(1)} = \gamma_{tw} \left(\tilde{\underline{\eta}}_1^{(1)} \otimes \tilde{\underline{K}}_1^{(1)} \right)$. Par ailleurs, il faut prendre en compte la rotation des constantes élastiques dans les macles par rapport à la matrice. En notant $\underline{Q}^{(1)}$ la matrice de réorientation du réseau (voir [Annexe B](#)), on exprime le tenseur des constantes élastiques $\underline{\lambda}^{(1)}$ dans le variant de macle 1 en fonction de celui de la matrice $\underline{\lambda}^{(m)}$ par un changement de base :

$$\underline{\lambda}^{(1)} = \underline{Q}^{(1)T} \cdot \left(\underline{Q}^{(1)T} \cdot \underline{\lambda}^{(m)} \cdot \underline{Q}^{(1)} \right) \cdot \underline{Q}^{(1)}. \quad (2.37)$$

On définit le champ des constantes élastiques dans le système par une loi de mélange pondérée par φ :

$$\underline{\lambda}(\varphi) = \varphi(\underline{\mathcal{X}}, t) \underline{\lambda}^{(1)} + [1 - \varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)] \underline{\lambda}^{(m)}. \quad (2.38)$$

Finalement, l'ensemble des ingrédients permettant d'écrire un modèle champ de phase du maclage mécanique $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ en élasticité dans un formalisme géométriquement linéaire est réuni. En considérant l'équation (2.30), la loi d'évolution du champ de phase donnant l'évolution du variant de macle s'écrit :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -L \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi}, \quad \text{avec} \quad \mathcal{F} = \mathcal{F}_{\text{int}} + \mathcal{F}_{\text{el}}. \quad (2.39)$$

où \mathcal{F}_{int} et \mathcal{F}_{el} sont définis respectivement dans les équations (2.4) et (2.33).

On a (voir [équation \(2.7\)](#)) :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{\text{int}}}{\delta \varphi} = W g'(\varphi) - \alpha \Delta \varphi, \quad (2.40)$$

et la force motrice élastique :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{\text{el}}}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \underline{\varepsilon}^e : \frac{\partial \underline{\lambda}}{\partial \varphi} : \underline{\varepsilon}^e - \underline{\sigma} : \frac{\partial \underline{\varepsilon}^*}{\partial \varphi}. \quad (2.41)$$

Dans le cas d'un variant de macle, l'équation (2.41) s'écrit :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{\text{el}}}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \underline{\varepsilon}^e : \left(\underline{\lambda}^{(1)} - \underline{\lambda}^{(m)} \right) : \underline{\varepsilon}^e - \underline{\sigma} : \underline{\varepsilon}^{0(1)}. \quad (2.42)$$

Le temps nécessaire à l'accommodation élastique (relaxation des champs mécaniques) dans le réseau est considéré très petit devant le temps caractéristique d'évolution de la microstructure. On considère donc que le système est à équilibre mécanique statique, à savoir :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \underline{u}} = 0. \quad (2.43)$$

Cette équation traduit l'équilibre mécanique en terme de minimisation de l'énergie élastique par rapport au degré de liberté \underline{u} . Dans le cas où l'on considère des conditions aux limites en contraintes appliquées (voir équation (2.35)), il est nécessaire de considérer une équation supplémentaire relative au degré de liberté lié à la déformation moyenne $\langle \underline{\varepsilon} \rangle$:

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \langle \underline{\varepsilon} \rangle} = 0. \quad (2.44)$$

On note que l'équation (2.44) est équivalente à $\langle \underline{\sigma}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle = \underline{\sigma}^{app}$. Dans le cadre géométriquement linéaire, les équations (2.43) et (2.44) de l'équilibre mécanique sont linéaires en déplacements et déformation moyenne. On peut donc les résoudre dans l'espace de Fourier en imposant des conditions aux limites périodiques sur la partie hétérogène des champs de déplacement (Moulinec et Suquet [1998], Boussinot et al. [2010]). L'algorithme de résolution utilisé est détaillé dans l'Annexe C.

2.2.1 Résolution numérique de la loi d'évolution du champ de phase

On s'intéresse au cas où l'on considère un variant de macle mécanique $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ identifié par le champ $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$. Afin d'étudier l'évolution de ce champ, on résout numériquement l'équation d'évolution (2.39).

Pour cela, on la discrétise en temps par un simple schéma en différences finies d'ordre un, semi-implicite :

$$\frac{\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t + dt) - \varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)}{dt} = -L \left\{ W g'(\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)) - \alpha \Delta \varphi(\underline{\mathcal{X}}, t + dt) + \frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi}(\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)) \right\}, \quad (2.45)$$

où dt est le pas de temps. On discrétise l'espace de manière régulière, avec un pas de grille d constant et égal dans les trois dimensions. En imposant des conditions aux limites périodiques sur le champ φ , cette discrétisation régulière permet d'appliquer des transformées de Fourier discrètes dans l'espace considéré et, finalement, de faciliter la résolution de l'équation d'évolution du champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$. On introduit donc les Transformées de Fourier Discrètes (TFD) suivantes :

$$\begin{aligned} \hat{f}(\underline{q}) &= \mathcal{TF} \{ f(\underline{\mathcal{X}}) \} = \frac{1}{N} \sum_{\underline{\mathcal{X}}} f(\underline{\mathcal{X}}) e^{-i\underline{q} \cdot \underline{\mathcal{X}}}, \\ f(\underline{\mathcal{X}}) &= \mathcal{TF}^{-1} \{ \hat{f}(\underline{q}) \} = \sum_{\underline{q}} \hat{f}(\underline{q}) e^{i\underline{q} \cdot \underline{\mathcal{X}}}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

où f est une fonction réelle dans l'espace direct, \mathcal{TF} l'application qui à f associe sa TFD \hat{f} , \mathcal{TF}^{-1} l'application qui à \hat{f} associe sa TFD inverse f , \underline{q} le vecteur d'onde associé à la variable spatiale $\underline{\mathcal{X}}$ et N le nombre total de nœuds de la grille. Pour une boîte de simulation 3D de $N = N_x \times N_y \times N_z$ nœuds munie d'une base $\mathcal{B} = (\underline{X}, \underline{Y}, \underline{Z})$, la base réciproque $\mathcal{B}' = (\underline{X}^*, \underline{Y}^*, \underline{Z}^*)$ utilisée dans l'espace de Fourier est définie de la façon suivante :

$$\underline{X}^* = \frac{1}{V} \underline{Y} \wedge \underline{Z}, \quad \underline{Y}^* = \frac{1}{V} \underline{Z} \wedge \underline{X}, \quad \underline{Z}^* = \frac{1}{V} \underline{X} \wedge \underline{Y},$$

où V est le volume de la maille du réseau direct. Les vecteurs $\underline{\mathcal{X}}$ et \underline{q} sont définis par rapport à ces bases de la façon suivante :

$$\underline{\mathcal{X}} = d(n, m, p)_{\mathcal{B}} \quad \text{et} \quad \underline{q} = \frac{2\pi}{d} \left(\frac{h}{N_x}, \frac{k}{N_y}, \frac{l}{N_z} \right)_{\mathcal{B}'}, \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} n | h &= 0, \dots, N_x - 1, \\ m | k &= 0, \dots, N_y - 1, \\ p | l &= 0, \dots, N_z - 1. \end{aligned}$$

On utilise les propriétés suivantes de la transformée de Fourier :

$$\mathcal{TF} \left\{ \frac{\partial f}{\partial \underline{\mathcal{X}}} \right\} = i \underline{q} \hat{f}(\underline{q}), \quad \mathcal{TF} \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial \underline{\mathcal{X}}^2} \right\} = -\underline{q}^2 \hat{f}(\underline{q}), \quad (2.47)$$

pour transformer le laplacien de l'équation (2.45). Ainsi, on obtient une expression du champ de phase dans l'espace réciproque à l'instant $(t + dt)$:

$$\hat{\varphi}(\underline{q}, t + dt) = \frac{\hat{\varphi}(\underline{q}, t) - L dt \mathcal{TF} \left\{ W g'(\varphi) + \frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi} \right\}}{1 + L dt \alpha \underline{q}^2}. \quad (2.48)$$

Finalement, l'application d'une transformée de Fourier inverse permet d'obtenir l'expression du champ de phase dans l'espace réel $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t + dt)$, et donc l'évolution temporelle de la microstructure.

2.2.2 Adimensionnement du problème

Afin de simplifier la résolution numérique de la loi d'évolution (équation (2.48)) et de l'équilibre mécanique (équations (2.43) et (2.44)), les différentes grandeurs physiques considérées dans le problème sont adimensionnées. Les grandeurs caractéristiques considérées sont données dans le tableau 2.1.

Unité de densité d'énergie f_{ad} (en J/m ³)	W
Unité de longueur l_{ad} (en m)	d
Unité de temps t_{ad} (en s)	$\frac{1}{f_{ad} L}$

TABLEAU 2.1 – Grandeurs caractéristiques utilisées pour l'adimensionnement.

Les grandeurs adimensionnées sont notées à l'aide d'un tilde. On a alors :

$$\widetilde{W} = \frac{W}{f_{ad}} = 1, \quad (2.49)$$

$$\widetilde{\alpha} = \frac{\alpha}{f_{ad} l_{ad}^2}, \quad (2.50)$$

$$\widetilde{\gamma} = \frac{\gamma}{f_{ad} l_{ad}}, \quad (2.51)$$

$$\widetilde{\delta} = \frac{\delta}{l_{ad}}, \quad (2.52)$$

$$\widetilde{L} = L \times f_{ad} t_{ad} = 1, \quad (2.53)$$

$$\widetilde{t} = \frac{t}{t_{ad}}, \quad \widetilde{dt} = \frac{dt}{t_{ad}}, \quad (2.54)$$

$$\widetilde{\lambda}_{ijkl} = \frac{\lambda_{ijkl}}{W}, \quad \widetilde{\sigma}_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{W}. \quad (2.55)$$

Dans la mesure où L entre dans la définition de notre échelle de temps, il est naturel qu'on obtienne une mobilité adimensionnée \widetilde{L} unitaire (équation (2.53)). Pour fixer l'échelle des temps, la connaissance de la mobilité L est indispensable. Malheureusement, dans le cas du maillage mécanique, il est très difficile de mesurer les vitesses de propagation à partir desquelles on pourrait déduire L . L'ensemble de nos résultats sont donc présentés en terme de temps adimensionné. Dès lors que la valeur de L est disponible, on peut de manière simple remonter au temps physique à l'aide de l'équation (2.54).

Après adimensionnement, ne reste dans l'équation d'évolution que le temps sans dimension \widetilde{t} . C'est ce temps là qui est discrétisé de manière adéquate. Il s'avère qu'un pas de discrétisation \widetilde{dt} de l'ordre de 10^{-1} est adapté. Ainsi, en considérant le vecteur d'onde adimensionné $\widetilde{q} = \underline{q} d$, l'adimensionnement de l'équation d'évolution (2.48) donne :

$$\widehat{\varphi}(\widetilde{q}, \widetilde{t} + \widetilde{dt}) = \frac{\widehat{\varphi}(\widetilde{q}, \widetilde{t}) - \widetilde{dt} \mathcal{T}\mathcal{F} \left\{ g'(\varphi) + \frac{\delta \widetilde{\mathcal{F}}_{el}}{\delta \varphi} \right\}}{1 + \widetilde{dt} \widetilde{\alpha} \widetilde{q}^2}, \quad (2.56)$$

où $\frac{\delta \widetilde{\mathcal{F}}_{el}}{\delta \varphi}$ correspond à l'adimensionnement de la force motrice élastique exprimée dans l'équation (2.41).

Dans le cas où l'on ne considère qu'un seul variant de macle (numéroté 1), on obtient :

$$\frac{\delta \widetilde{\mathcal{F}}_{el}}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij}^e \left[\widetilde{\lambda}_{ijkl}^{(1)} - \widetilde{\lambda}_{ijkl}^{(m)} \right] \varepsilon_{kl}^e - \widetilde{\sigma}_{ij} \varepsilon_{ij}^0{}^{(1)}. \quad (2.57)$$

2.3 Implémentation numérique et résultats préliminaires

Pour résoudre numériquement la loi d'évolution (2.56) du champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$, il est important de noter le formalisme continu développé dans ce chapitre est implémenté sur un espace discrétisé

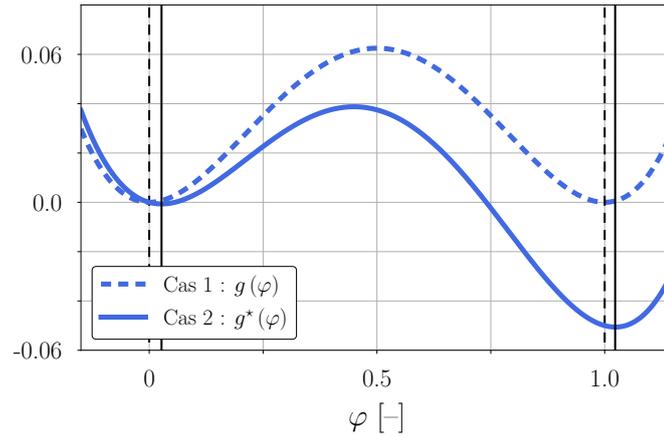


FIGURE 2.3 – Fonction double-puits tiltée $g^*(\varphi)$. Les traits verticaux noirs repèrent les minima des fonctions g (en pointillés) et g^* (en dur).

(grille définie dans la Section 2.2.1).

Le modèle continu est invariant par translation. Toutefois, cette propriété est perdue lors de la discrétisation spatiale, ce qui conduit à un phénomène de friction numérique des interfaces. Ce phénomène dépend exponentiellement du rapport entre la longueur de discrétisation et l'épaisseur de l'interface. Afin de rendre la friction numérique négligeable, il est nécessaire de considérer au minimum 6 nœuds pour résoudre la largeur de l'interface 2δ (définie dans la Section 2.1.1). C'est ce que nous vérifions dans la section suivante.

En gardant les notations introduites dans ce chapitre, ainsi que l'adimensionnement des grandeurs physiques introduit dans la Section 2.2.2, il est donc nécessaire de respecter la relation $2\delta = 6d$, ou encore $2\tilde{\delta} = 6$. Une fois le pas de grille d fixé, on peut déterminer le premier paramètre numérique δ (demi-largeur d'interface) introduit dans le modèle.

Ensuite, il est nécessaire de connaître l'énergie d'interface γ (voir Section 2.1.2). On peut déterminer γ à l'aide de simulations atomistiques ou à partir d'observations expérimentales. Dans cette section, on commence par choisir une valeur d'énergie d'interface $\gamma = 200 \text{ mJ/m}^2$. Elle est du même ordre de grandeur que celle choisie par Gu *et al.* [2013] (déduite des travaux de Porter *et al.* [2009]) pour des macles mécaniques dans le tantale à température ambiante (structure c.c.).

Une fois les paramètres δ et γ choisis, on peut déduire des équations (2.11) et (2.19) les valeurs des paramètres W et α introduits dans le modèle via le terme f_{int} exprimé dans l'équation (2.4).

2.3.1 Sans prise en compte de l'énergie élastique

Afin de vérifier que le choix des paramètres d , W et α permet d'éviter le frottement sur réseau d'une part, et de valider l'obtention d'un profil à l'équilibre en tangente hyperbolique pour le champ considéré d'autre part, on s'intéresse à la croissance et à la décroissance d'un précipité sphérique initial au sein d'une matrice. Ces deux situations ont l'avantage d'avoir une solution analytique pour l'évolution temporelle du rayon $R(t)$ du précipité (voir par exemple Langer [1992], Lebbad [2018]). Le cas de

Taille de la boîte de simulation (en nm)	$128 \times 128 \times 128$
Pas de grille d (en nm)	1
Pas de temps adimensionné \tilde{dt}	8×10^{-2}
Largeur d'interface adimensionnée $2\tilde{\delta}$	6
Pré-facteur double-puits W (en J/m^3)	8×10^8
Pré-facteur gradient α (en J/m)	9×10^{-10}
Énergie d'interface γ (en J/m^2)	0,2

TABLEAU 2.2 – Paramètres numériques relatifs aux simulations des Cas 1 et 2 de la Section 2.3.

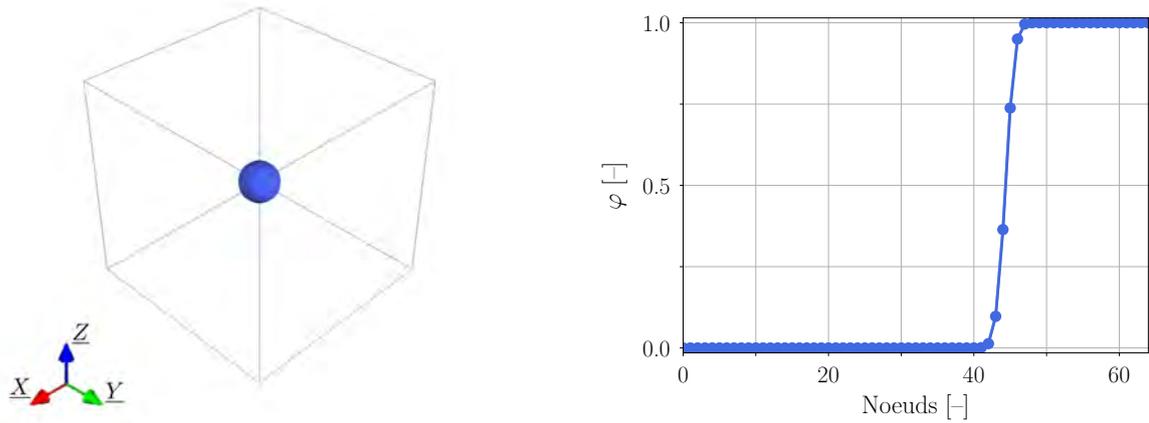
la décroissance du précipité se fait naturellement par minimisation de l'énergie d'interface (voir Section 2.1.3). Afin de faire croître le précipité, on considère une fonction double-puits tiltée de 5% en $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ (voir figure 2.3). Cette fonction s'écrit $g^*(\varphi) = g(\varphi) - H\varphi$ et permet d'avoir une croissance du précipité en fonction du temps. Le paramètre H est ici nommé paramètre conjugué du champ φ . On considèrera $H = 5\%$ dans le reste de cette section. Le léger décalage des minima, qui ne sont plus en 0 et 1, n'est ici pas important (aucune propriété n'est ici interpolée à l'aide de φ).

On note "Cas 1" et "Cas 2" respectivement les cas de la décroissance et de la croissance du précipité sphérique (associés à l'usage de $g(\varphi)$ ou $g^*(\varphi)$). Les paramètres numériques introduits dans les simulations sont présentés dans le tableau 2.2.

Comme vu précédemment, on note N_x , N_y et N_z le nombre de nœuds respectifs le long des directions \underline{X} , \underline{Y} et \underline{Z} définissant le repère de la base orthonormée \mathcal{B} de la boîte de simulation. Pour les deux cas étudiés, on considère un précipité sphérique initial positionné au centre de la boîte, de rayon $R = 20$ nm, où $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t) = 1$. Une interface diffuse d'environ 6 nœuds est introduite via un filtre gaussien sur le champ considéré. La figure 2.4a montre une représentation 3D de l'isosurface $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t) = 0,5$ à l'instant initial $t = 0$. Le profil $\varphi(\underline{\mathcal{X}} = (i, N_y/2, N_z/2), t = 0)$ pour i allant de 0 à $N_x/2$ dans la direction \underline{X} est présenté sur la figure 2.4b.

La figure 2.5 montre l'état du champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t = t_f)$ dans les cas 1 et 2 (croissance et décroissance du précipité sphérique), avec t_f le temps final de la simulation. Dans les deux cas, on confirme l'obtention d'un profil en tangente hyperbolique (équation (2.14)), avec environ 6 nœuds sur celle-ci (figures 2.5b et 2.5d). Dans le cas de la croissance, on note que le champ de phase dans le précipité et dans la matrice ont des valeurs différentes de 0 et 1 (figure 2.5d), induites par une modification de la position des minima du potentiel, générée par la présence du terme linéaire en H .

Afin de s'assurer que $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ évolue sans frottement sur réseau, on s'intéresse maintenant à la cinétique de l'interface. Dans le cas d'un précipité sphérique, l'équation différentielle suivante permet d'obtenir



(a) Configuration initiale : représentation 3D de l'isosurface $\varphi = 0,5$.

(b) Configuration initiale : profil de φ le long de l'axe \underline{X} .

FIGURE 2.4 – Configuration initiale du champ $\varphi(\underline{X}, t)$ étudiée dans les cas 1 et 2.

l'évolution du rayon R en fonction du temps dans les cas 1 et 2 ($H = 0$ ou $H = 5\%$) (Langer [1992]) :

$$\frac{dR(t)}{dt} = L \alpha \left(\frac{H}{\gamma} - \frac{\mathcal{D} - 1}{R(t)} \right), \quad (2.58)$$

avec \mathcal{D} la dimension du problème, ici prise égale à 3.

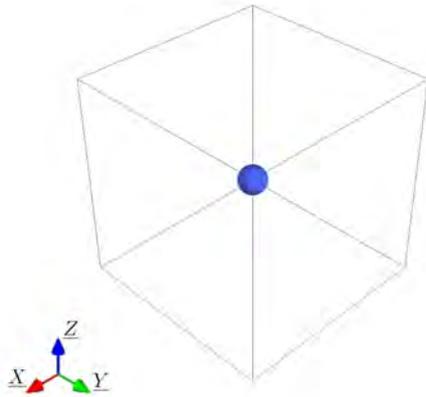
Dans les deux cas étudiés, on récupère le rayon numérique R_{num} du précipité à différents instants le long de \underline{X} . La valeur du rayon numérique est récupérée au point où la valeur du champ φ est la plus proche de 0,5 (milieu de l'interface). Nous avons vérifié que la mesure du rayon ainsi réalisée est similaire à ce que l'on obtient à l'aide d'un *fit* d'une tangente hyperbolique sur l'interface.

Sur la figure 2.6, on représente l'évolution temporelle théorique et numérique du rayon du précipité, dans les cas 1 (décroissance) et 2 (croissance). Les figures 2.6a et 2.6b correspondent respectivement aux résultats obtenus pour une interface contenant 5 et 6 nœuds. On voit alors que le choix de la largeur d'interface $2\tilde{\delta} = 6$ permet d'obtenir une évolution temporelle du champ de phase φ en adéquation avec la solution analytique (erreur relative moyenne de 0,9% dans le cas 2), et donc de rendre négligeable le phénomène de friction numérique. Ce dernier est bien visible dans le cas 2 sur la figure 2.6a où sont considérés 5 nœuds sur l'interface (erreur relative moyenne de 2,9%).

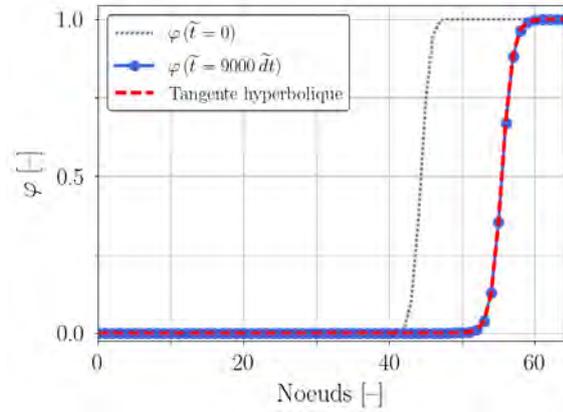
Plus la simulation est longue, plus l'écart entre les solutions analytique et numérique s'accroît. En choisissant 6 nœuds sur l'interface, on obtient un champ $\varphi(\underline{X}, t)$ qui garde une morphologie isotrope (sphérique) dans les cas de la décroissance (cas 1) et de la croissance (cas 2).

2.3.2 Avec prise en compte de l'énergie élastique

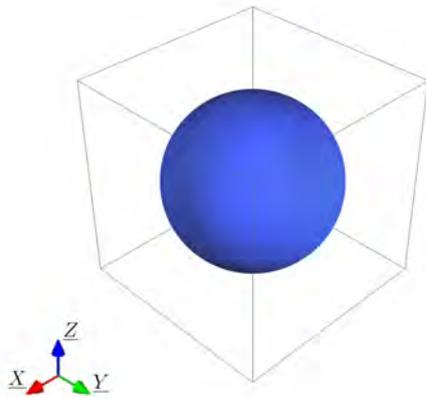
Dans cette section, le champ de phase $\varphi(\underline{X}, t)$ permet de localiser un variant de macle de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. On associe alors le tenseur de déformation libre $\xi^*(\varphi)$ relatif au variant de macle n°1



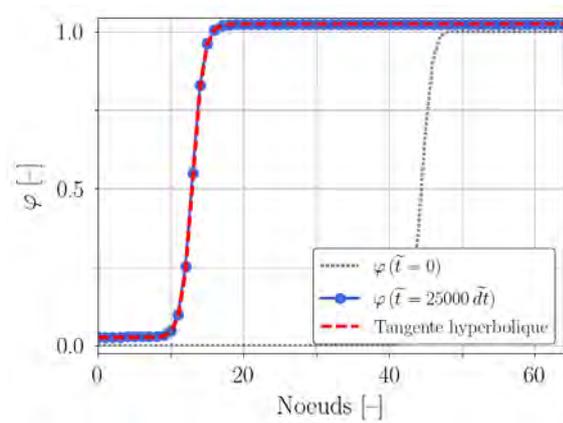
(a) Cas 1 : représentation 3D de l'isosurface $\varphi = 0,5$ à $\tilde{t} = 720$ ($9000 \tilde{d}t$).



(b) Cas 1 : profil de φ le long de l'axe \underline{X} à $\tilde{t} = 0$, en gris, et $\tilde{t} = 720$ ($9000 \tilde{d}t$), en bleu.



(c) Cas 2 : représentation 3D de l'isosurface $\varphi = 0,5$ à $\tilde{t} = 2000$ ($25000 \tilde{d}t$).

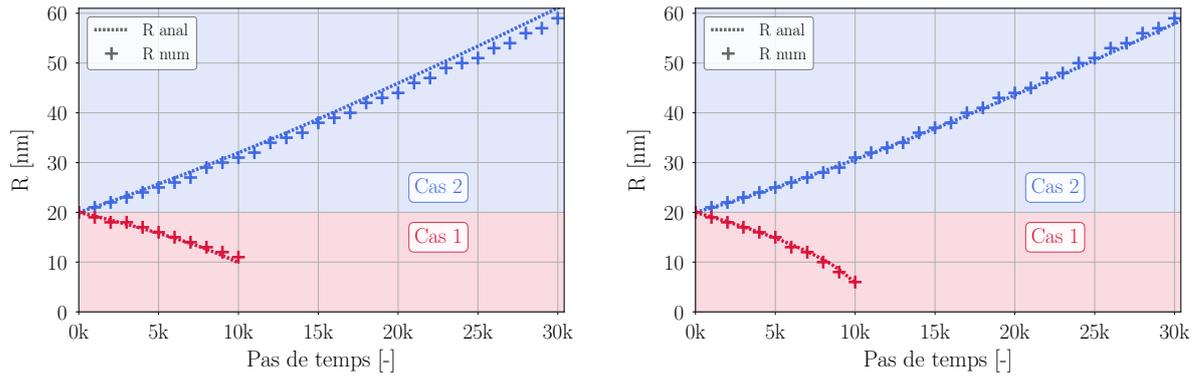


(d) Cas 2 : profil de φ le long de l'axe \underline{X} à $\tilde{t} = 0$, en gris, et $\tilde{t} = 2000$ ($25000 \tilde{d}t$), en bleu.

FIGURE 2.5 – Évolution du champ $\varphi(\underline{x}, t)$: (a), (b) dans le cas 1 et (c), (d) dans le cas 2.

(332) $[11\bar{3}]$ au sein du champ de phase (voir [équation \(2.36\)](#) et [Annexe B](#)). La densité d'énergie élastique f_{el} n'est plus considérée nulle, et s'écrit comme présentée dans [équation \(2.35\)](#). Sachant que le profil obtenu dans la section précédente respecte bien la solution en tangente hyperbolique démontrée dans la [Section 2.1.1](#), on étudie l'effet de la prise en compte de l'élasticité sur celui-ci.

La boîte de simulation est orientée selon la base \mathcal{B}_1 du variant de macle (332) $[11\bar{3}]$ étudié. Les vecteurs \underline{X} , \underline{Y} et \underline{Z} composant la base orthonormée \mathcal{B}_1 sont donc respectivement choisis comme des vecteurs unitaires dans les directions $\underline{\eta}_1^{(1)} = [11\bar{3}]$, $\underline{K}_1^{(1)} = [332]$ et $\underline{P}^{(1)} = [1\bar{1}0]$ (normale au plan de cisaillement). Dans cette base, le tenseur de cisaillement relatif au variant de macle s'écrit de la façon


 (a) Évolution de $R(t)$ avec 5 nœuds sur l'interface.

 (b) Évolution de $R(t)$ avec 6 nœuds sur l'interface.

 FIGURE 2.6 – Comparaison de l'évolution du rayon d'un précipité sphérique de rayon initial $R = 20$ nm dans les cas 1 (décroissance, en rouge) et 2 (croissance, en bleu). La solution analytique est représentée avec des pointillés et les résultats numériques avec des croix. (a) Cas où l'on considère 5 nœuds sur l'interface. (b) Cas où l'on considère 6 nœuds sur l'interface.

λ (en GPa)	63
μ (en GPa)	26
γ_{tw}	$\frac{\sqrt{2}}{4}$

TABLEAU 2.3 – Données élastiques : constantes élastiques et cisaillement associé au mode de maillage étudié.

suivante :

$$\varepsilon^{0(1)} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{tw}/2 & 0 \\ \gamma_{tw}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}_1}. \quad (2.59)$$

On considère des conditions aux limites en contraintes appliquées $\underline{\sigma}^{app}$ nulles. Les constantes élastiques sont ici considérées isotropes et homogènes. Les valeurs des coefficients de Lamé λ et μ sont tirées de la thèse de [Martin \[2017\]](#) et correspondent à des matériaux type titane β -métastable. Les données élastiques introduites dans le calcul numérique sont retrouvées dans le [tableau 2.3](#).

Un germe de macle sphérique initial de rayon $R = 20$ nm est introduit au centre de la boîte de simulation. Les paramètres numériques associés au reste du modèle sont donnés dans le [tableau 2.2](#). Ils sont identiques à ceux du Cas 1 de la section précédente, pour lequel le paramètre conjugué du champ φ est nul ($H = 0$).

La [figure 2.7](#) montre l'évolution temporelle de la moyenne du champ de phase $\langle \varphi \rangle$ dans les cas avec et sans élasticité. Pour le cas sans élasticité, cette représentation est analogue à l'évolution du rayon R du précipité dans le cas 1 de la [figure 2.6b](#). La cinétique de transformation se retrouve fortement impactée par l'ajout du tenseur de déformation libre au sein de la macle avec une décroissance très rapide de la valeur moyenne du champ à zéro. Si, comme attendu en l'absence de forces extérieures appliquées au

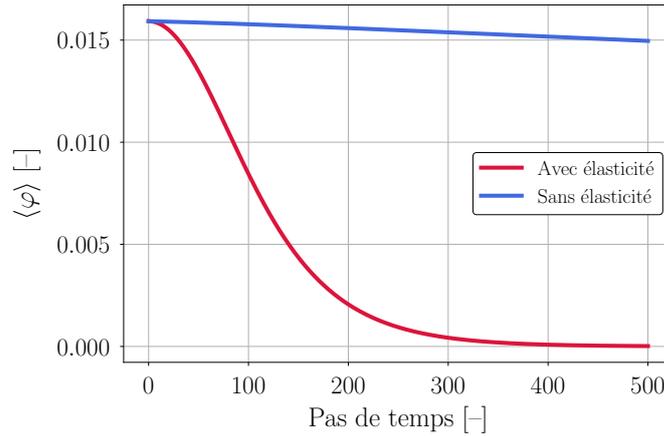


FIGURE 2.7 – Comparaison de l'évolution de la valeur moyenne de φ dans les cas sans élasticité et avec élasticité (contraintes appliquées nulles).

système, le germe tend à disparaître au profit de la matrice ("démaçlage"), la [figure 2.8](#) montre que la baisse de la valeur moyenne du champ de phase est principalement due à la décroissance progressive de la valeur du champ dans le germe (*bulk*) et non au déplacement rapide de l'interface.

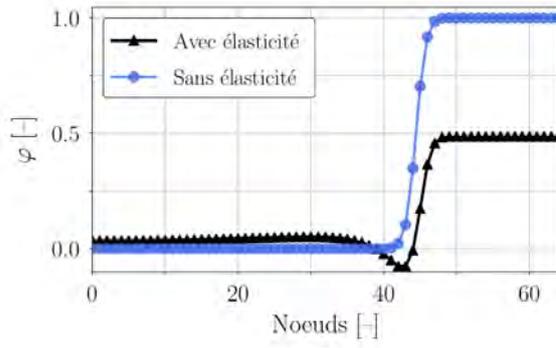
De plus, comme on peut le voir sur la [figure 2.8](#), la forme du profil est fortement affectée par l'ajout de l'énergie élastique. Rapidement en début de transformation ($\tilde{t} = 4$), on observe que le profil ne suit plus la tangente hyperbolique obtenue précédemment ([figures 2.8a](#) et [2.8b](#)) : la forme de l'interface n'est plus simplement dictée par la fonction double-puits $g(\varphi)$ et le terme en gradient de φ . La discrimination macle-matrice est en particulier fortement impactée, avec notamment l'étalement de l'interface dans la direction \underline{Z} , voire l'apparition de valeurs négatives le long de \underline{X} . La représentation des coupes selon \underline{X} et \underline{Z} du champ $\varphi(\underline{X}, t)$ montre également une brisure claire de l'isotropie du comportement de l'interface qui était observée dans le cas sans élasticité. Ici, ce phénomène est uniquement induit par la prise en compte du tenseur de déformation libre à l'intérieur du variant de macle (332) [113].

2.3.3 Stabilité du profil en tangente hyperbolique

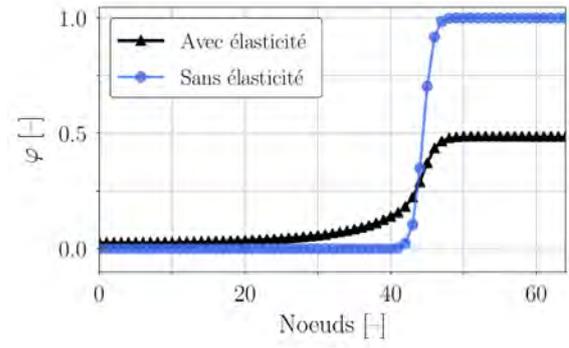
Dans l'objectif de développer un modèle permettant de décrire le déplacement d'une interface macle-matrice, il est nécessaire de changer la nature des couplages entre le champ de phase et les champs élastiques. En particulier, l'interpolation (2.36) du champ de tenseur de déformation libre et l'interpolation (2.38) du champ de tenseur des constantes élastiques avaient été choisies linéaires. De nouvelles expressions de $\underline{\lambda}(\varphi)$ et de $\underline{\varepsilon}^*(\varphi)$ sont maintenant considérées (voir raisonnement dans la [Section 1.3.3](#)).

L'interpolation sur le champ $\varphi(\underline{X}, t)$ des données élastiques est à présent écrite à l'aide d'une fonction d'interpolation $h(\varphi)$ qui s'écrit sous la forme :

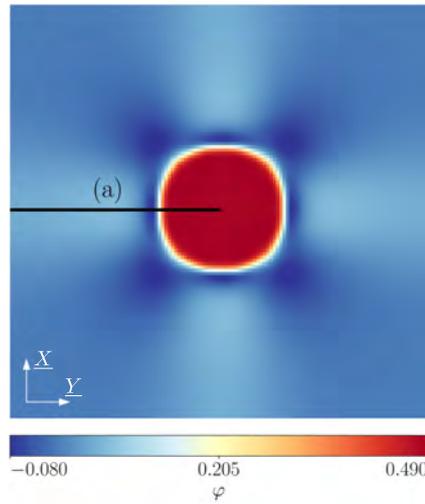
$$h(\varphi) = \varphi^3 [3\varphi(2\varphi - 5) + 10]. \quad (2.60)$$



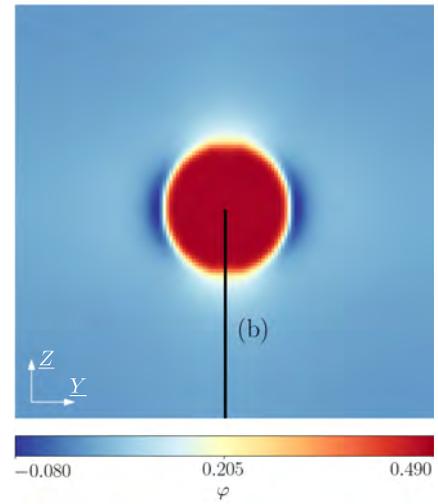
(a) Comparaison des profils du champ φ le long de \underline{X} à $\tilde{t} = 4$: sans élasticité en bleu, avec élasticité en noir.



(b) Comparaison des profils du champ φ le long de \underline{Z} à $\tilde{t} = 4$: sans élasticité en bleu, avec élasticité en noir.



(c) Section \underline{Z} du champ φ à $\tilde{t} = 4$ passant par le centre de boîte : en noir le profil avec élasticité tracé sur la figure 2.8a.



(d) Section \underline{X} du champ φ à $\tilde{t} = 4$ passant par le centre de boîte : en noir le profil avec élasticité tracé sur la figure 2.8b.

FIGURE 2.8 – Influence de l'élasticité sur l'évolution du champ φ . (a) et (b) : comparaison des profils le long de \underline{X} et \underline{Z} avec et sans élasticité. (c) et (d) : sections \underline{Z} et \underline{X} du champ φ passant par le centre de la boîte, dans le cas avec élasticité.

Cette fonction a les propriétés suivantes :

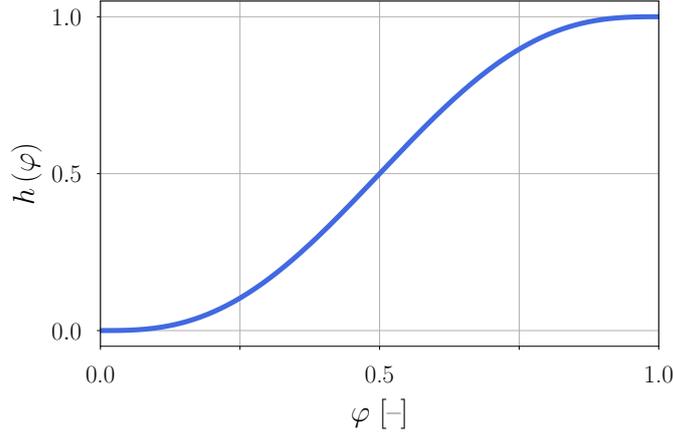
$$\begin{cases} h(\varphi = 0) = 0, & h(\varphi = 1) = 1, \\ h'(\varphi = 0) = h'(\varphi = 1) = 0, \\ h''(\varphi = 0) = h''(\varphi = 1) = 0. \end{cases} \quad (2.61)$$

Les expressions suivantes de $\lambda(\varphi)$ et $\varepsilon^*(\varphi)$ remplacent celles présentées dans les équations (2.38) et (2.36) :

$$\lambda(\varphi) = h(\varphi) \lambda^{(1)} + [1 - h(\varphi)] \lambda^{(m)}, \quad (2.62)$$

$$\varepsilon^*(\varphi) = h(\varphi) \varepsilon^{0(1)}. \quad (2.63)$$

La fonction $h(\varphi)$ est représentée sur la figure 2.9. Les équations (2.62) et (2.63) impliquent une modifi-


 FIGURE 2.9 – Représentation graphique de la fonction d'interpolation $h(\varphi)$.

cation importante de la force motrice élastique jusqu'alors utilisée, exprimée dans l'équation (2.42). En effet, en reprenant l'expression générale de la force motrice élastique exprimée dans l'équation (2.41), celle-ci s'écrit maintenant :

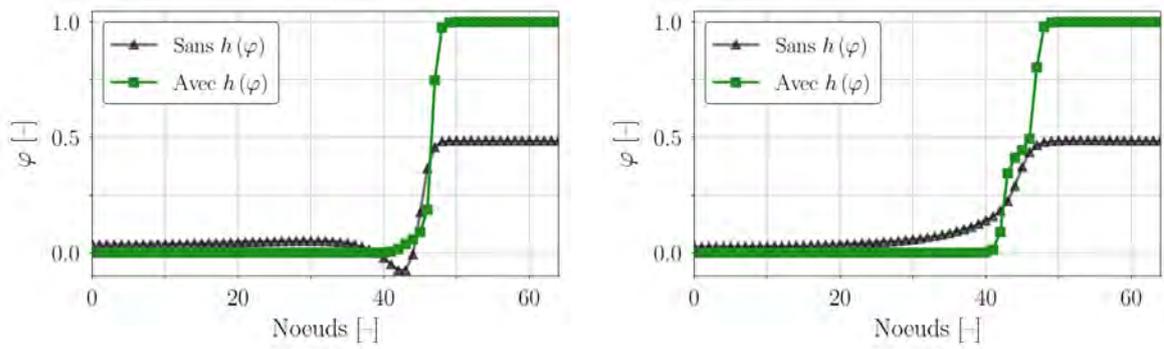
$$\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \underline{\underline{\xi}}^e : h'(\varphi) \left(\underline{\underline{\lambda}}^{(1)} - \underline{\underline{\lambda}}^{(m)} \right) : \underline{\underline{\xi}}^e - h'(\varphi) \left(\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\xi}}^{0(1)} \right). \quad (2.64)$$

On note alors que la force motrice est nulle pour $\varphi = 0$ ou 1 , ce qui n'était pas le cas dans la section précédente (où $h(\varphi) = \varphi$). Cela implique l'obtention d'un champ $\varphi(\underline{\underline{X}}, t)$ stable pour chacun des deux états du matériau, et donc que la transformation matrice-macle ne se fait que par mouvement de l'interface initiale. Notons également que cette formulation de $h(\varphi)$ inhibe toute possibilité de nucléation à partir d'un champ $\varphi(\underline{\underline{X}}, t)$ initialement nul dans toute la boîte de simulation (dérivées secondes de $h(\varphi)$ nulles en $\varphi = 0$). Ce point sera discuté dans la Section 4.4.

La figure 2.10 permet de voir l'effet de la prise en compte de la fonction d'interpolation $h(\varphi)$ dans les équations (2.62) et (2.63) sur l'évolution du champ $\varphi(\underline{\underline{X}}, t)$. Les figures 2.10a et 2.10b montrent une comparaison des profils de $\varphi(\underline{\underline{X}}, t)$ obtenus dans le cas précédent (avec élasticité, sans $h(\varphi)$) en noir, et dans le cas avec élasticité et $h(\varphi)$, en vert. On voit alors que l'ajout de $h(\varphi)$ empêche les variations du champ $\varphi(\underline{\underline{X}}, t)$ à l'intérieur de la matrice et de la macle, où il reste stable et respectivement égal à 0 et 1. Toutefois, on voit sur les figures 2.10c et 2.10d que l'interface macle-matrice reste fortement perturbée et présente un comportement anisotrope.

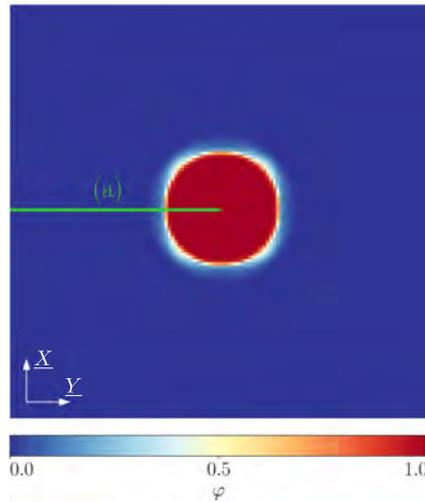
À $\tilde{t} = 4$, on compte environ 6 nœuds sur l'interface pour les profils verts le long de $\underline{\underline{X}}$ et $\underline{\underline{Z}}$, ce qui peut paraître satisfaisant du point de vue de la friction sur réseau. Or, on peut voir sur la figure 2.11 que le comportement anisotrope de l'interface initiale provoque finalement un étalement de l'interface dans la direction $\underline{\underline{Z}}$ (profil B en vert) après quelques pas de calculs (à $\tilde{t} = 12$). Ce résultat montre alors que le profil de l'interface dépend fortement de l'état mécanique, chose qui n'est pas souhaitée car, par exemple, l'énergie d'interface et la friction de réseau sont directement reliées au profil.

Il est important de remarquer que, dans le cas d'une étude 2D, sur une section de normale $\underline{\underline{Z}}$, ce phénomène ne s'exprime pas. En effet, le profil de $\varphi(\underline{\underline{X}}, t)$ le long de $\underline{\underline{X}}$ est identique à celui obtenu le long de $\underline{\underline{Y}}$. Toutefois, on voit nettement l'impact de l'élasticité dans le cas d'une simulation en 3D, avec l'éta-

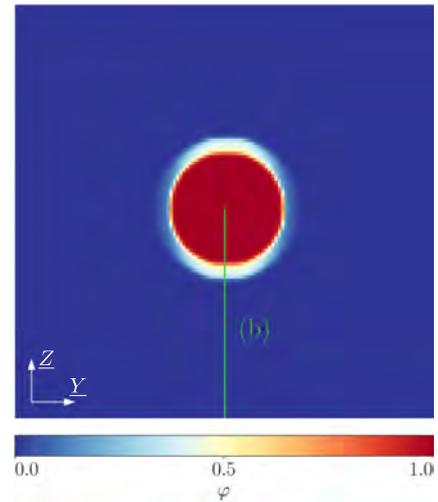


(a) Comparaison des profils du champ φ le long de \underline{X} à $\tilde{t} = 4$: sans $h(\varphi)$ en noir, avec $h(\varphi)$ en vert.

(b) Comparaison des profils du champ φ le long de \underline{Z} à $\tilde{t} = 4$: sans $h(\varphi)$ en noir, avec $h(\varphi)$ en vert.



(c) Section \underline{Z} du champ φ à $\tilde{t} = 4$ passant par le centre de boîte : en vert le profil avec élasticité tracé sur la figure 2.10a.

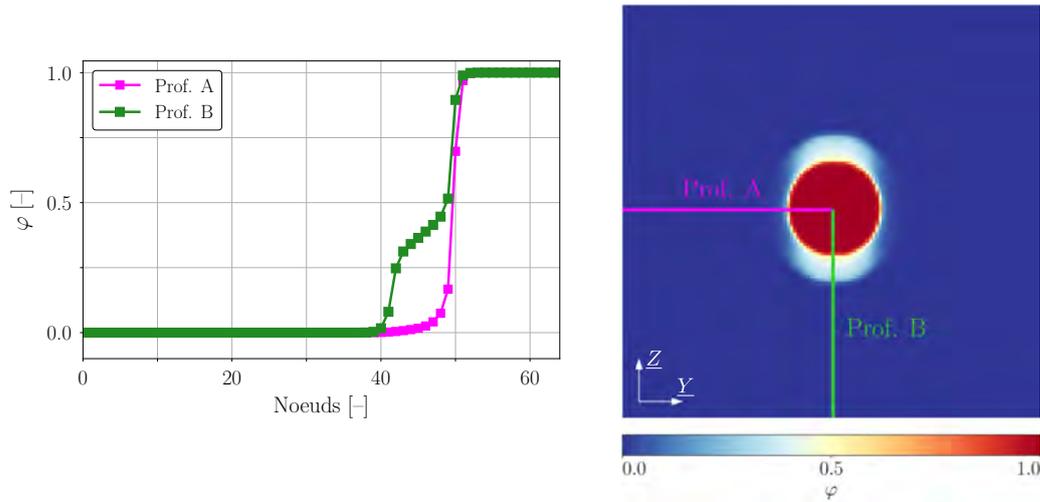


(d) Section \underline{X} du champ φ à $\tilde{t} = 4$ passant par le centre de boîte : en vert le profil avec élasticité tracé sur la figure 2.10b.

FIGURE 2.10 – Représentation du champ φ dans le cas avec élasticité, après introduction de la fonction d’interpolation $h(\varphi)$. (a) et (b) : comparaison des profils le long de \underline{X} et \underline{Z} avec et sans $h(\varphi)$. (c) et (d) : sections \underline{Z} et \underline{X} du champ φ passant par le centre de la boîte, dans le cas avec $h(\varphi)$.

lement de l’interface qui se fait le long de la direction \underline{Z} .

La prise en compte d’une fonction d’interpolation $h(\varphi)$ pour les champs mécaniques (équations (2.62) et (2.63)) a permis de stabiliser le comportement du champ $\varphi(\underline{X}, t)$ dans le “bulk” (à l’intérieur de la matrice ou de la macle), mais ne permet pas de garder une morphologie d’interface isotrope. On rappelle que l’on souhaite obtenir un profil du champ $\varphi(\underline{X}, t)$ se rapprochant le plus d’une tangente hyperbolique (d’épaisseur fixe) lorsque l’on traverse la macle, et cela dans toutes les directions du problème. En utilisant une densité d’énergie libre exprimée en fonction de la fonction double-puits $g(\varphi)$ (voir équation (2.3)), le profil en tangente hyperbolique est évidemment obtenu lorsque la densité d’énergie élastique f_{el} dans le système est nulle. On peut donc penser conserver ce type de profil dans le cas où, au niveau de l’interface, le poids de l’énergie d’interface \mathcal{F}_{int} est grand devant celui de l’énergie



(a) Comparaison des profils du champ φ le long de \underline{Y} (Profil A, en rose) et \underline{Z} (Profil B, en vert) à $\tilde{t} = 12$.

(b) Section \underline{Z} du champ φ à $\tilde{t} = 12$ passant par le centre de boîte. Les profils de φ le long des lignes rose et verte sont tracés sur la figure 2.11a.

FIGURE 2.11 – Champ φ dans le cas avec élasticité, après introduction de la fonction d'interpolation $h(\varphi)$. (a) et (b) : comparaison des profils le long de \underline{X} et \underline{Z} avec et sans $h(\varphi)$. (c) et (d) : sections \underline{Z} et \underline{X} du champ φ passant par le centre de la boîte, dans le cas avec $h(\varphi)$.

élastique \mathcal{F}_{el} .

À partir de cette remarque, on cherche alors à trouver une condition sur les paramètres entrant en jeu dans le problème qui permettrait de conserver un profil de $\varphi(\underline{X}, t)$ proche d'une tangente hyperbolique en présence de forces motrices d'origine élastique. La relation suivante doit ainsi être respectée au niveau de l'interface de volume ω :

$$\gamma dS \gg \int_{\omega} f_{el} d\omega, \quad (2.65)$$

où γ est l'énergie de surface. Si Δ est l'ordre de grandeur de l'épaisseur de l'interface (voir figure 2.12), cette inégalité devient :

$$\gamma \gg f_{el}^{int} \Delta, \quad (2.66)$$

où f_{el}^{int} est la densité d'énergie élastique typique d'un point de l'interface.

En gardant les paramètres matériaux inchangés (constantes élastiques du matériau et tenseur de déformation libre associé au système de macle étudié), on voit que l'énergie d'interface et la largeur de l'interface sont les deux degrés de liberté sur lesquels nous pouvons jouer pour conserver approximativement un profil en tangente hyperbolique. Cependant, une contrainte supplémentaire doit être considérée : on souhaite avoir environ 6 nœuds sur l'interface. Dans le cas d'une boîte de dimension $128 \times 128 \times 128$ nœuds, avec un pas de grille $d = 1$ nm, l'interface a alors une largeur d'environ 6 nm. En comparaison avec les observations expérimentales, cette largeur d'interface macle-matrice est élevée (voir Chapitre 1).

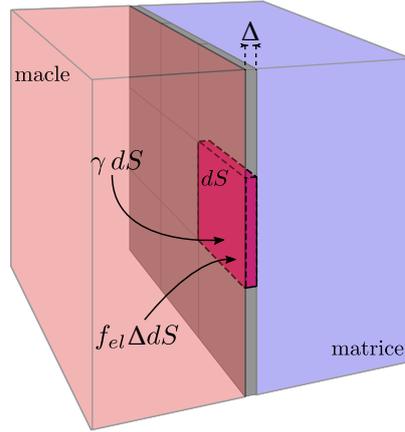


FIGURE 2.12 – Représentation schématique de la compétition entre énergie d'interface et énergie élastique au niveau d'un élément d'interface de volume $d\omega = \Delta \times dS$. En gris, l'interface macle-matrice, en rouge l'élément considéré.

Si l'on voulait considérer une largeur d'interface de l'ordre de 0,5 nm et un germe de macle de taille identique aux précédents, il faudrait considérer un pas de grille valant $d/12$ et donc une taille de boîte de simulation près de 1800 fois plus grande en terme de nombres de nœuds¹. On décide de fixer le pas de grille à $d = 1$ nm (sauf si une autre valeur est précisée). Finalement, nous avons choisi de modifier la valeur de l'énergie d'interface afin d'obtenir un profil plus proche d'une tangente hyperbolique.

Afin d'avoir un ordre de grandeur de la valeur de γ qu'il faut considérer, on cherche à évaluer de manière grossière la valeur maximale de la densité d'énergie élastique f_{el}^{int} . En s'inspirant des travaux de [Khachatryan \[1983\]](#), on évalue la densité d'énergie élastique d'une inclusion sphérique présentant un tenseur de déformation libre ε^0 (de la même forme que celui exprimé dans l'équation (2.36)) à l'aide de l'expression suivante :

$$f_{el}^{int} \sim \frac{1}{2} \lambda_{2323} (\varepsilon^0)^2, \quad (2.67)$$

Dans le cas où les constantes élastiques sont isotropes ($\lambda_{2323} = \mu$), cette approximation permet d'évaluer grossièrement la valeur de γ qu'il faut considérer pour que le rôle de l'énergie élastique reste marginal :

$$\gamma \gg f_{el}^{int} \Delta = \frac{\Delta}{2} \mu (\varepsilon^0)^2. \quad (2.68)$$

La largeur d'interface Δ étant fixée à 6 nm et en utilisant les paramètres élastiques donnés plus haut (voir [tableau 2.3](#)), on obtient $\gamma \gg 9,75 \text{ J/m}^2$. On voit alors que le choix initial de $0,2 \text{ J/m}^2$ est loin de valider cette inéquation, et ne permet donc pas de maintenir approximativement un profil d'interface en tangente hyperbolique. Sachant que la valeur de f_{el}^{int} surestime la valeur maximale de la densité d'énergie élastique, on choisit une valeur de γ plus faible mais du même ordre de grandeur, soit $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$.

1. La méthode champ de phase "sharp" (SPFM) proposée par [Finel et al. \[2018\]](#) pourrait être une solution au problème discuté dans cette section. Cette méthode permet de s'affranchir de la contrainte des 6 nœuds sur l'interface, et permettrait alors de résoudre une largeur d'interface de l'ordre de 1 nm avec un seul nœud.

La [figure 2.13](#) montre l'évolution du champ $\varphi(\underline{x}, t)$ avec cette nouvelle valeur d'énergie d'interface γ . À noter que la modification de γ induit une modification de W (voir [équation \(2.19\)](#)), et donc de l'unité de temps t_{ad} (voir [tableau 2.1](#)). Les vues en coupe ([figures 2.13c](#) et [2.13d](#)) montrent une interface à morphologie isotrope, contrairement à ce que l'on a rencontré pour $\gamma = 0,2 \text{ J/m}^2$ ([figure 2.11](#)). En observant les profils ([figures 2.13a](#) et [2.13b](#)), on voit la nette différence obtenue pour les deux valeurs de γ étudiées. Le profil en tangente hyperbolique théorique passant par le centre de l'interface est également tracé dans les deux directions étudiées (en pointillés noirs). Finalement, on voit que le profil résultant de la simulation avec $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ (en orange) est bien contrôlé : il se superpose bien avec la forme attendue (en \tanh) de manière isotrope, avec environ 6 nœuds sur l'interface. Dès lors, à moins que cela soit précisé, une énergie d'interface $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ sera considérée dans l'ensemble des simulations présentées dans ces travaux de thèse.

2.4 Étude de la croissance d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$

Dans cette section, la croissance d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ est considérée à l'aide de trois modèles champ de phase exprimés dans le cadre géométriquement linéaire. L'étude est focalisée sur la morphologie et sur l'orientation cristallographique des variants de macle. Les trois modèles sont basés, dans l'ordre, sur une énergie d'interface isotrope, une énergie d'interface anisotrope et sur une énergie d'interface anisotrope avec largeur d'interface constante.

2.4.1 Cas de l'énergie d'interface isotrope

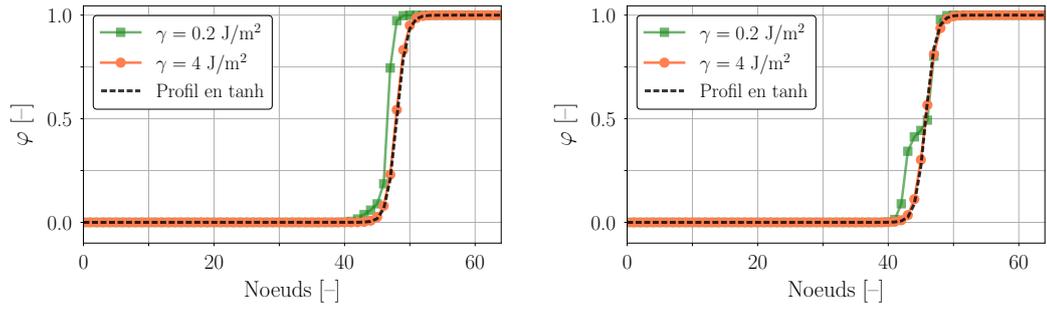
On s'intéresse ici à la croissance d'un variant de macle de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ sous contrainte. La section précédente a permis de mettre en place les paramètres du modèle champ de phase permettant d'obtenir une interface macle-matrice contrôlée dans le cas où la contrainte appliquée $\underline{\sigma}^{app}$ est nulle. Dans ce cas, la macle tend évidemment à disparaître puisque l'excès d'énergie dû à la présence d'une interface n'est contrebalancée par aucune force motrice d'origine volumique. Afin de faire croître le variant de macle sans modification du potentiel double-puits (c.-à-d. $H = 0$ dans la [Section 2.3.1](#)), il est nécessaire d'apporter de l'énergie au système. Pour cela, on peut introduire une contrainte appliquée non-nulle au système.

Conditions aux limites périodiques en contraintes appliquées

On choisit d'étudier l'un des cas de chargement les plus simples : la traction simple. Dans un repère orthonormé de base $\mathcal{B} = (\underline{X}, \underline{Y}, \underline{Z})$, le tenseur $\underline{\sigma}^{app}$ associé à une traction simple d'amplitude $\sigma^0 > 0$ le long de \underline{X} s'écrit :

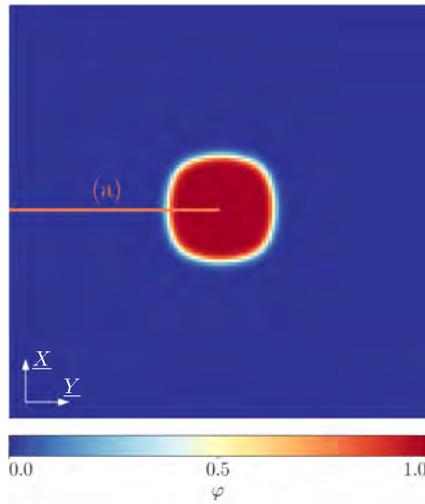
$$\underline{\sigma}^{app} = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}. \quad (2.69)$$

Il faut alors déterminer l'axe de traction et l'amplitude de la contrainte qui permet la croissance du germe de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ choisi.

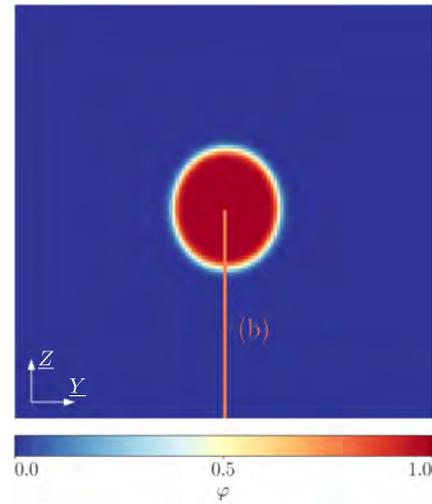


(a) Profil du champ φ le long de \underline{X} à $\tilde{t} = 4$ avec élasticité et $h(\varphi)$, avec $\gamma = 0,2 \text{ J/m}^2$ (vert) et $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ (orange).

(b) Profil du champ φ le long de \underline{Z} à $\tilde{t} = 4$ avec élasticité et $h(\varphi)$, avec $\gamma = 0,2 \text{ J/m}^2$ (vert) et $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ (orange).



(c) Section \underline{Z} du champ φ à $\tilde{t} = 4$ passant par le centre de boîte : en orange le profil avec $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ tracé sur la figure 2.17a.



(d) Section \underline{X} du champ φ à $\tilde{t} = 4$ passant par le centre de boîte : en orange le profil avec $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ tracé sur la figure 2.17b.

FIGURE 2.13 – Représentation du champ φ dans le cas avec élasticité et $h(\varphi)$, pour $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$. (a) et (b) : comparaison des profils le long de \underline{X} et \underline{Z} avec $\gamma = 0,2 \text{ J/m}^2$ et $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$. (c) et (d) : sections \underline{Z} et \underline{X} du champ φ passant par le centre de la boîte, dans le cas $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$. Les segments oranges correspondent aux profils représentés sur les figures 2.13a et 2.13b pour $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$.

Les travaux de [Min et al. \[2013\]](#) et [Zhou et al. \[2017\]](#) montrent que les variants de macles primaires observés expérimentalement lors d'essais de traction concordent avec des valeurs élevées du facteur de Schmid (SF). D'un point de vue énergétique, on retrouve dans les travaux de [Lebensohn et Tomé \[1993\]](#) et [Lee et Yoo \[1990\]](#) que le minimum d'énergie pour un système similaire au système ici étudié (macles dans une matrice soumise à une traction) est atteint quand la contrainte de cisaillement projetée (*Resolved shear stress, RSS*) respecte la loi de Schmid. Dans le cas d'un variant de macles (332) $[11\bar{3}]$, de direction de maillage $\underline{\eta}_1^{(1)} = [11\bar{3}]$ et de normale au plan de maillage $\underline{K}_1^{(1)} = [332]$, le facteur de Schmid SF pour une traction simple le long d'un axe de vecteur directeur unitaire \underline{t} est donné par la relation suivante :

$$SF = \left(\underline{t} \cdot \underline{\tilde{\eta}}_1^{(1)} \right) \left(\underline{t} \cdot \underline{\tilde{K}}_1^{(1)} \right), \quad (2.70)$$

où $\underline{\tilde{\eta}}_1^{(1)}$ et $\underline{\tilde{K}}_1^{(1)}$ sont respectivement des vecteurs unitaires dans les directions $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{\eta}_1^{(1)}$. La direction

\underline{t} de traction est alors choisie de manière à maximiser le facteur de Schmid SF . Cette valeur maximale est obtenue pour un angle $\widehat{(\underline{t}, \underline{\eta}_1^{(1)})} = 45^\circ$ dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)} = [1\bar{1}0]$.

Il reste alors à déterminer la valeur de l'amplitude de la traction σ^0 à appliquer afin de faire croître le germe de macle initial. Puisque la force motrice est nulle dans les domaines et que l'on attend une croissance du germe dans toutes les directions de l'espace, un moyen rapide de prévoir la croissance du germe initial est de calculer le signe de la valeur moyenne de la force motrice $\left\langle \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi} \right\rangle$ pour la configuration initiale. On peut ainsi déterminer la valeur seuil σ^c de l'amplitude de la contrainte à appliquer pour faire croître le précité en traction simple.

Ici, on choisit d'estimer l'ordre de grandeur de l'amplitude de la traction à appliquer de manière différente. On s'intéresse à la variation d'énergie libre ΔF associée à la présence d'un germe de macle initial au sein d'un système homogène soumis à une contrainte appliquée $\underline{\sigma}^{app}$. Dans le cas d'un germe initial Ω_0 de forme sphérique de rayon $R_0 = 12$ nm, de volume V_0 et de surface S_0 , auquel serait associé un tenseur de déformation libre $\underline{\varepsilon}^0$, Mura [1987] donne l'expression de la variation d'énergie élastique $\overline{\Delta W}$ induite par la présence du germe :

$$\overline{\Delta W} = -\frac{1}{2} \int_{\Omega_0} \sigma_{ij}^{inc} \varepsilon_{ij}^0 dV - \int_{\Omega_0} \sigma_{ij}^{app} \varepsilon_{ij}^0 dV, \quad (2.71)$$

avec $\underline{\sigma}^{inc}$ le tenseur des contraintes dans le germe de macle et $\underline{\varepsilon}^0$ exprimé de la même façon que dans l'équation (2.36). Le premier terme de l'équation (2.71) correspond à l'énergie élastique de déformation induite par la présence de la macle, en l'absence de contraintes appliquées. Le deuxième terme correspond à l'énergie d'interaction entre la macle et la contrainte appliquée. Vu que l'on considère un germe initial sphérique, le calcul du premier terme peut être obtenu analytiquement car la contrainte est uniforme dans l'inclusion (Eshelby [1957]). L'équation (2.71) se réécrit alors de la façon suivante :

$$\overline{\Delta W} = -\frac{V_0}{2} \left[\frac{7-5\nu}{15(1-\nu)} \mu \gamma_{tw}^2 + \sigma^0 \gamma_{tw} \right], \quad (2.72)$$

où $\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$ est le coefficient de Poisson du matériau considéré. Pour obtenir la variation d'énergie libre ΔF associée à la présence du germe de macle, il est nécessaire de prendre en compte l'énergie d'interface qui lui est associé. Dans la Section 2.3.3, on a choisi $\gamma = 4$ J/m². On a alors :

$$\Delta F = \overline{\Delta W} + \gamma S_0. \quad (2.73)$$

La figure 2.14 montre l'évolution de la variation d'énergie associée à la présence de la macle rapportée au volume $\frac{\Delta F}{V_0}$ en fonction de l'amplitude de traction σ^0 appliquée au système. On voit alors que ce terme s'annule et devient négatif pour des valeurs de l'ordre de 10 GPa. Cette valeur correspond donc au seuil critique σ^c à partir duquel un germe de macle sphérique de rayon $R_0 = 12$ nm est instable et croît.

La figure 2.15 représente la valeur de la contrainte critique à considérer ($\Delta F = 0$) en fonction du rayon du germe de macle initial. On observe évidemment que la prise en compte d'un germe de macle initial plus gros permet de diminuer le seuil de contrainte σ^c au-delà duquel le germe croît. Cependant, on se limite à un rayon initial $R_0 = 12$ nm, ce qui permettra par la suite de pouvoir considérer différents germes de variants de macle au sein d'une boîte de simulation de taille raisonnable. Le tenseur

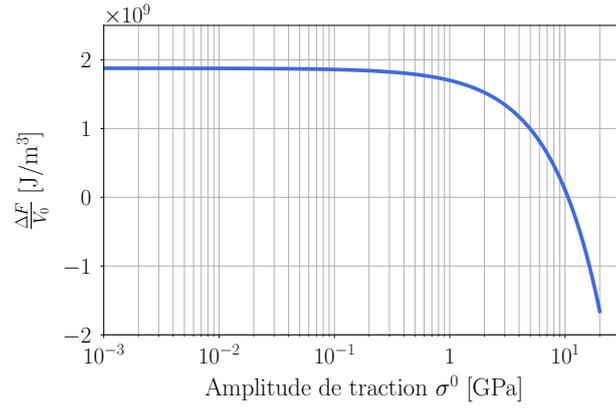


FIGURE 2.14 – Représentation graphique de l'évolution de $\frac{\Delta F}{V_0}$ en fonction de l'amplitude de la contrainte appliquée σ^0 pour un germe sphérique de rayon $R_0 = 12$ nm.

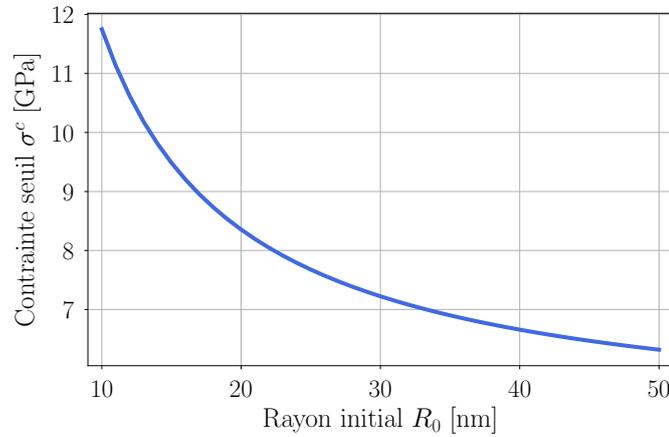


FIGURE 2.15 – Représentation graphique de l'évolution de la contrainte seuil σ^c en fonction du rayon R_0 du germe sphérique initial ($\gamma = 4$ J/m²).

\mathcal{G}^{app} obtenu, exprimé dans la base \mathcal{B}_1 du variant de macle $(332) [11\bar{3}]$ étudié (voir Section 2.3.2), s'écrit finalement :

$$\mathcal{G}^{app} = \frac{\sigma^0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}_1}. \quad (2.74)$$

La figure 2.16 montre l'évolution de la moyenne du champ non-conservé $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ initialement associé à un germe de macle $(332) [11\bar{3}]$ sphérique de rayon $R = 12$ nm, avec $\gamma = 4$ J/m² en considérant des conditions aux limites périodiques sur les contraintes : $\langle \mathcal{G}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle = \mathcal{G}^{app}$ avec $\sigma^0 = 8$ GPa. Le reste des paramètres du modèle champ de phase sont identiques aux simulations précédentes (voir tableaux 2.2 et 2.3) et les axes cubiques de la boîte de simulation correspondent aux vecteurs de la base \mathcal{B}_1 .

On note que la valeur de σ^0 choisie est inférieure à la valeur critique de 10 GPa identifiée précédemment à l'aide de la figure 2.14. En début de simulation (voir inset de la figure 2.16), on voit que la moyenne du champ de phase diminue, signe que la contrainte appliquée n'est pas suffisante pour induire la croissance de la macle lorsque celle-ci est initialement sphérique. Cependant, cette décrois-

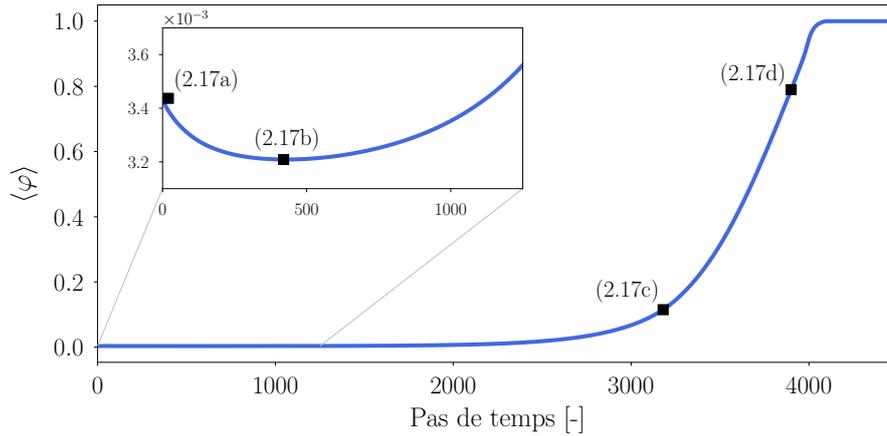


FIGURE 2.16 – Représentation graphique de l'évolution de $\langle \varphi \rangle$ en fonction du nombre de pas de calcul en contrainte appliquée avec $\sigma^0 = 8$ GPa. Les carrés noirs correspondent aux configurations 3D présentées dans la figure 2.17.

sance n'est que transitoire et, à partir de 400 pas de temps ($\tilde{t} = 32$), la croissance de la macle a lieu. Sur la figure 2.17, on peut voir que ce régime transitoire rend en fait compte d'une modification de la morphologie de la macle. En effet, comme attendu (voir par exemple les travaux de Lee et Yoo [1990]) la morphologie sphérique d'une macle mécanique ne minimise pas l'énergie de déformation élastique du système pour un volume donné. Plus précisément, si l'on considère un cylindre infini de section elliptique dans la direction $\underline{P}^{(1)}$, Lee et Yoo [1990] montre que l'énergie élastique est minimale (et nulle) dans le cas d'une section elliptique avec un rapport d'aspect de 0. Cela correspond à une morphologie lamellaire normale à $\underline{\eta}_1^{(1)}$ ou $\underline{K}_1^{(1)}$ dans le plan de cisaillement (plan de normale $\underline{P}^{(1)}$). Dans le cas de la simulation réalisée, la figure 2.17 montre qu'au fil de son évolution, la macle mécanique évolue vers une forme d'aiguille allongée dans la direction $\underline{P}^{(1)}$ jusqu'à rencontrer son image périodique dans la direction \underline{Z} . atteindre les bords de la boîte de simulation, où les conditions périodiques s'appliquent sur le champ φ . La figure 2.18 montre des sections de normales $\underline{P}^{(1)}$ et $\underline{\eta}_1^{(1)}$ de la configuration 3D présentée dans la figure 2.17c. On voit que la macle croît de manière à favoriser des interfaces planes de normales $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{\eta}_1^{(1)}$ (respectivement \underline{X} et \underline{Y} sur la figure 2.18a), ce qui provoque la croissance d'une macle sous la forme d'une aiguille à section carrée. L'origine de la morphologie obtenue est discutée dans la Section 2.4.4.

Conditions aux limites périodiques en déformations appliquées

Dans le cas des conditions aux limites en contraintes appliquées (section précédente), la figure 2.16 montre que la macle croît jusqu'à remplir entièrement la boîte de simulation ($\langle \varphi \rangle = 1$). En effet, à partir du moment où la croissance est initiée et que la contrainte appliquée est maintenue, ce type de condition limite ne permet pas de limiter le volume de la macle au sein de la matrice. Augmenter la valeur de la contrainte appliquée σ^0 permet alors seulement de faire croître plus rapidement la macle au sein de la matrice.

Dans le cas des déformations appliquées, le comportement attendu est différent. C'est l'objet de ce

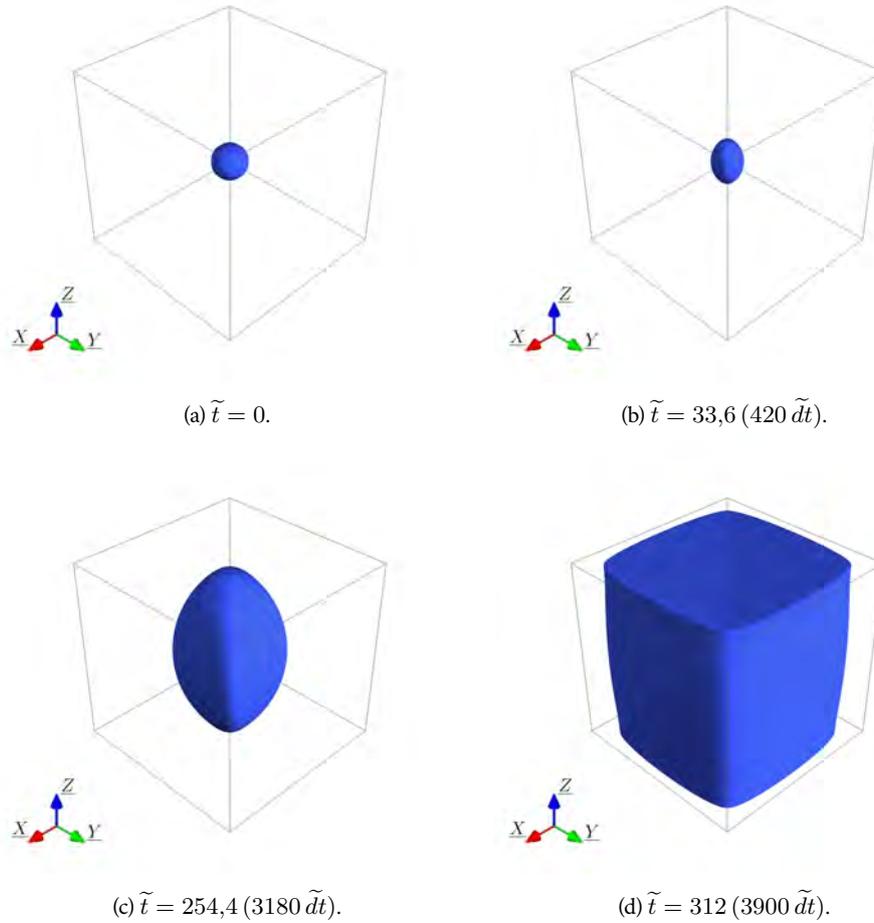


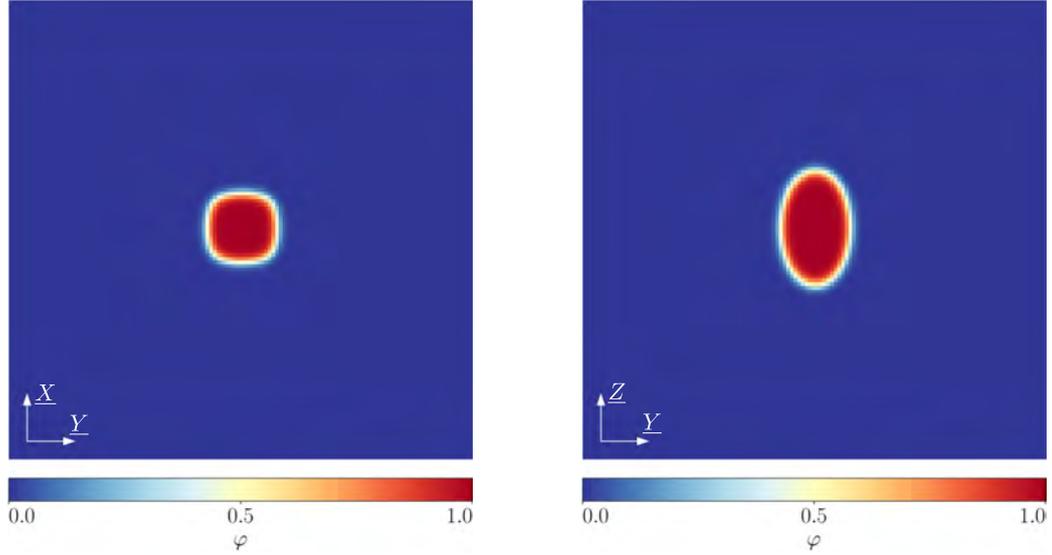
FIGURE 2.17 – Évolution de l'isosurface $\varphi = 0,5$ lors de la croissance d'un germe de macle $(332) [11\bar{3}]$ sphérique de rayon $R = 12$ nm soumis à une contrainte de traction $\sigma^0 = 8$ GPa dans la direction maximisant le facteur de Schmid. Les axes X , Y et Z sont respectivement associés aux directions cristallographiques $\eta_{\underline{1}} = [11\bar{3}]$, $\underline{K}_1 = [332]$ et $\underline{P} = [1\bar{1}0]$. (a) et (b) montrent l'évolution de la morphologie du germe initial en début de transformation (voir figure 2.16). (c) et (d) montrent l'évolution de la macle mécanique au sein de la matrice en milieu et fin de transformation (avant de remplir entièrement la boîte de simulation).

paragraphe. Afin d'assurer la croissance du germe de macle sphérique (considéré identique au cas précédent), on choisit un tenseur $\underline{\varepsilon}^{app}$ proche de la valeur de la déformation moyenne $\langle \underline{\varepsilon}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle$ obtenue dans le cas des contraintes appliquées à l'instant initial. En ne considérant que les valeurs des composantes les plus élevées qui apparaissent dans le tenseur de déformation moyen, le tenseur des déformations appliquées $\underline{\varepsilon}^{app}$ choisi s'écrit de la manière suivante :

$$\underline{\varepsilon}^{app} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma^{app} & 0 \\ \gamma^{app} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}_1}, \quad (2.75)$$

où γ^{app} est la valeur de cisaillement appliquée. On note que ce tenseur a la même forme que le tenseur de déformation libre $\underline{\varepsilon}^{0(1)}$ considéré dans ce chapitre.

Dans le cas des contraintes appliquées étudié précédemment ($\sigma^0 = 8$ GPa), on observe que la défor-



(a) Coupe normale à \underline{Z} passant par le centre de la boîte du champ $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, \tilde{t} = 33,6)$.

(b) Coupe normale à \underline{X} passant par le centre de la boîte du champ $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, \tilde{t} = 33,6)$.

FIGURE 2.18 – Cartes du champ $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, \tilde{t} = 33,6)$ relatives à la configuration 3D présentée dans la figure 2.17b. Les axes \underline{X} , \underline{Y} et \underline{Z} sont respectivement associés aux directions cristallographiques $\underline{\eta}_1 = [11\bar{3}]$, $\underline{K}_1 = [332]$ et $\underline{P} = [1\bar{1}0]$. (a) Coupe normale à \underline{P} passant par le centre de la boîte. (b) Coupe normale à $\underline{\eta}_1$ passant par le centre de la boîte.

mation moyenne $\langle \varepsilon_{12}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle = 7,75\%$ au début de la simulation. On choisit alors, pour une configuration initiale identique au cas précédent, la valeur du cisaillement appliquée $\gamma^{app} = 7,75\%$. L'évolution temporelle de la moyenne du champ $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ associé à la macle (fraction volumique de macle) est montrée en bleu sur la figure 2.19. Comme observé précédemment, on note une diminution de la fraction volumique de la macle (diminution de $\langle \varphi \rangle$). La valeur de cisaillement γ^{app} utilisée est donc inférieure à la valeur nécessaire à la croissance immédiate du germe initial. Après ce régime transitoire de relaxation, on observe le déclenchement de la croissance de la macle (inset figure 2.19). Cependant, contrairement au cas des contraintes appliquées, le variant de macle considéré croît jusqu'à atteindre une valeur stationnaire de $\langle \varphi \rangle = 0,43$. Le tracé de la dérivée temporelle de $\langle \varphi \rangle$ (en rouge sur la figure 2.19) montre bien que celle-ci s'annule en fin de simulation, et que la microstructure obtenue atteint finalement un équilibre.

On s'intéresse alors à l'évolution de la valeur finale de $\langle \varphi \rangle$ en fonction du choix de la valeur du cisaillement appliqué γ^{app} . Dans le cas d'un germe de macle sphérique initial de rayon $R = 12$ nm, on rappelle que la valeur γ^{app} critique permettant la croissance de la macle est de $7,75\%$. Ainsi, en considérant les paramètres jusqu'ici utilisés (et à déformation imposée γ^{app} constante), il n'est pas possible d'atteindre une valeur moyenne $\langle \varphi \rangle < 0,43$ en fin de simulation. La figure 2.20 montre les valeurs moyennes finales du champ φ obtenues en fonction du rapport $2\gamma^{app}/\gamma_{tw}$ (c.-à-d. $\varepsilon_{12}^{app}/\varepsilon_{12}^{0(1)}$). On observe alors que pour l'ensemble des simulations réalisées avec $\gamma_{app} > 7,75\%$, la valeur moyenne du champ φ suit une relation linéaire avec la valeur du ratio de cisaillement $2\gamma^{app}/\gamma_{tw}$. Ce résultat permet de statuer sur le fait que le contrôle de la fraction volumique de macle $\{332\}$ au sein de la microstruc-

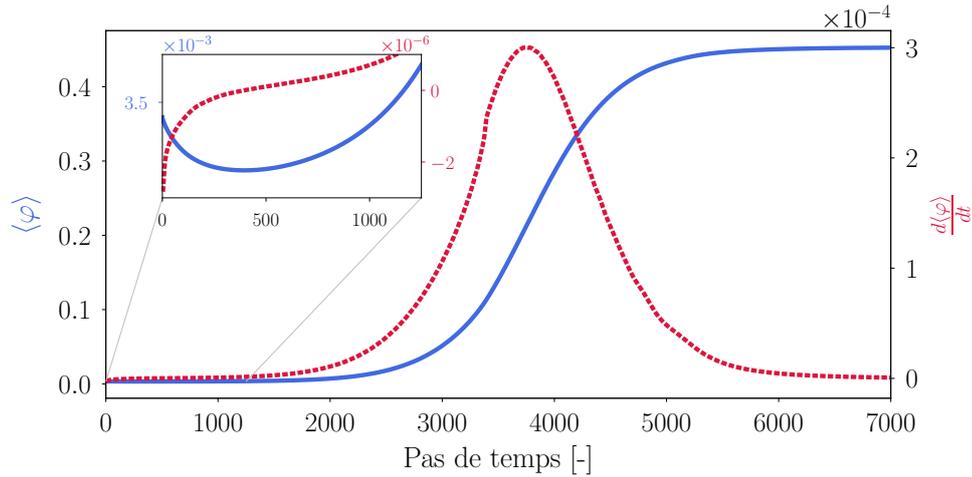


FIGURE 2.19 – Représentation graphique de (en bleu) l'évolution de $\langle \varphi \rangle$ et (en rouge) de $\frac{d\langle \varphi \rangle}{dt}$ en fonction du nombre de pas de calcul, avec $R = 12$ nm et cisaillement appliqué $\gamma^{app} = 7,75\%$.

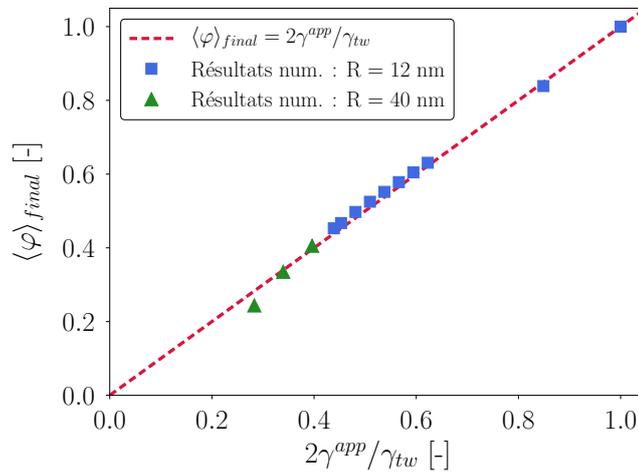


FIGURE 2.20 – Représentation graphique de l'évolution de $\langle \varphi \rangle$ en fonction du ratio $2\gamma^{app}/\gamma_{tw}$ (déformation appliquée).

ture est intimement lié à la valeur de la déformation moyenne de cisaillement projetée sur la base du variant de macle $\{332\}$ considéré, c.-à-d. la valeur de $\langle \underline{\varepsilon}_{12}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle$ exprimé dans la base \mathcal{B}_1 . En effet, en prenant le même tenseur de déformations appliquées $\underline{\varepsilon}^{app}$ que dans l'équation (2.75), et en ajoutant des termes (diagonaux par exemple), les valeurs de $\langle \varphi \rangle$ obtenues restent inchangées. On en déduit que, dans le cas où l'on ne considère qu'un variant de macle au sein d'une matrice en déformations appliquées, il est possible d'anticiper la fraction volumique finalement atteinte.

Or, on a vu que pour un germe de macle sphérique initial de rayon $R = 12$ nm, la valeur de $\gamma^{app} = 7,75\%$ critique est associée à une borne inférieure de la valeur finale de la fraction volumique de macle $\langle \varphi \rangle$. Si on veut abaisser cette borne (qui est de 43% dans le cas précédent), il faut diminuer la valeur du cisaillement appliqué γ^{app} tout en rendant possible la croissance de la macle. Pour cela, le rayon du germe initial sphérique doit être modifié. Par exemple, si l'on souhaite obtenir une fraction

volumique de macle de l'ordre de 28% en fin de simulation (c.-à-d. $\gamma^{app} \approx 5\%$ à l'aide de la [figure 2.20](#)), on peut remonter à la valeur de σ^c équivalente et déduire une valeur approximative du rayon R du germe sphérique initial permettant la croissance (voir [figure 2.15](#)). En suivant ce raisonnement, afin d'obtenir $\langle \varphi \rangle \approx 28\%$, il faut appliquer un cisaillement $\gamma^{app} = 5\%$ sur un germe sphérique dont le rayon est de l'ordre de 40 nm. La [figure 2.21](#) montre l'évolution du champ $\varphi(\underline{x}, t)$ à différents instants de la simulation pour $R = 40$ nm et $\gamma^{app} = 5\%$. Sur la [figure 2.20](#), on peut voir en vert la fraction volumique finale atteinte dans les cas où l'on applique un cisaillement γ^{app} valant 5%, 6% et 7% sur un germe initial de rayon $R = 40$ nm. Malgré les approximations faites, on reste dans le bon ordre de grandeur des fractions volumiques attendues.

On voit donc qu'il est nécessaire de considérer des germes sphériques initiaux de volume élevé si l'on veut obtenir des fractions volumiques faibles dans la microstructure finale. Ce dernier point n'est pas souhaité du fait que l'on limite les dimensions de la boîte. De plus, en suivant les travaux de [Lee et Yoo \[1990\]](#), basés sur l'analyse des bifurcations de forme de [Johnson et Cahn \[1984\]](#), on peut calculer un rayon approximatif d'un germe circulaire (2D dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$) au delà duquel considérer une morphologie initiale circulaire est instable. Ce rayon maximal est de l'ordre de 15 nm si l'on prend en compte une énergie d'interface γ égale à 4 J/m^2 et les données élastiques référencées dans le [tableau 2.3](#). Au delà de ce rayon, une bifurcation de forme a lieu, du disque à l'ellipse : cela montre qu'il n'est pas intéressant de considérer des germes de macle mécanique 2D circulaire de taille trop importante.

En se basant sur cette information, on suppose qu'une sphère de rayon inférieur à 15 nm peut bien représenter un germe de macle initial dans le cas 3D. Ainsi, dans la suite de ces travaux, l'ensemble des simulations considérant des germes de macle sphériques se basent sur cette hypothèse.

2.4.2 Cas de l'énergie d'interface anisotrope

Dans cette section, on cherche à obtenir une morphologie de macle comparable aux observations expérimentales (voir [Chapitre 1](#)). Ces observations montrent des formes de plaquettes, plus allongées dans la direction de cisaillement (c.-à-d. $\langle 11\bar{3} \rangle$) et dans la direction normale au plan de cisaillement (c.-à-d. $\langle 1\bar{1}0 \rangle$) que dans la direction normale au plan de maclage (c.-à-d. $\langle 332 \rangle$) ([Lai et al. \[2016\]](#)). Dans la section précédente, la prise en compte de l'élasticité provoquait déjà une anisotropie de croissance dans le sens où on observait une morphologie en aiguille se développer au sein de la matrice, avec pour direction de croissance majeure la direction $[1\bar{1}0]$ ($= \underline{P}^{(1)}$). La croissance favorisée dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ plutôt que dans la direction $\underline{K}_1^{(1)}$ n'est alors pas observée.

Dans le but de modéliser une croissance permettant d'obtenir des morphologies en accord avec les observations expérimentales, [Heo et al. \[2011\]](#), [Clayton et Knap \[2011a\]](#) ou encore [Gu et al. \[2013\]](#) proposent d'utiliser une énergie d'interface anisotrope. Celle-ci aurait des valeurs différentes selon la direction de maclage $\underline{\eta}_1^{(1)}$ ou le long de la direction normale au plan de maclage $\underline{K}_1^{(1)}$. Selon [Gu et al. \[2013\]](#), cette anisotropie serait due au fait que la propagation de macles mécaniques se fait par le biais d'un mouvement de dislocations de Shockley (partielles) en pointe de macle, dans la direction de ci-

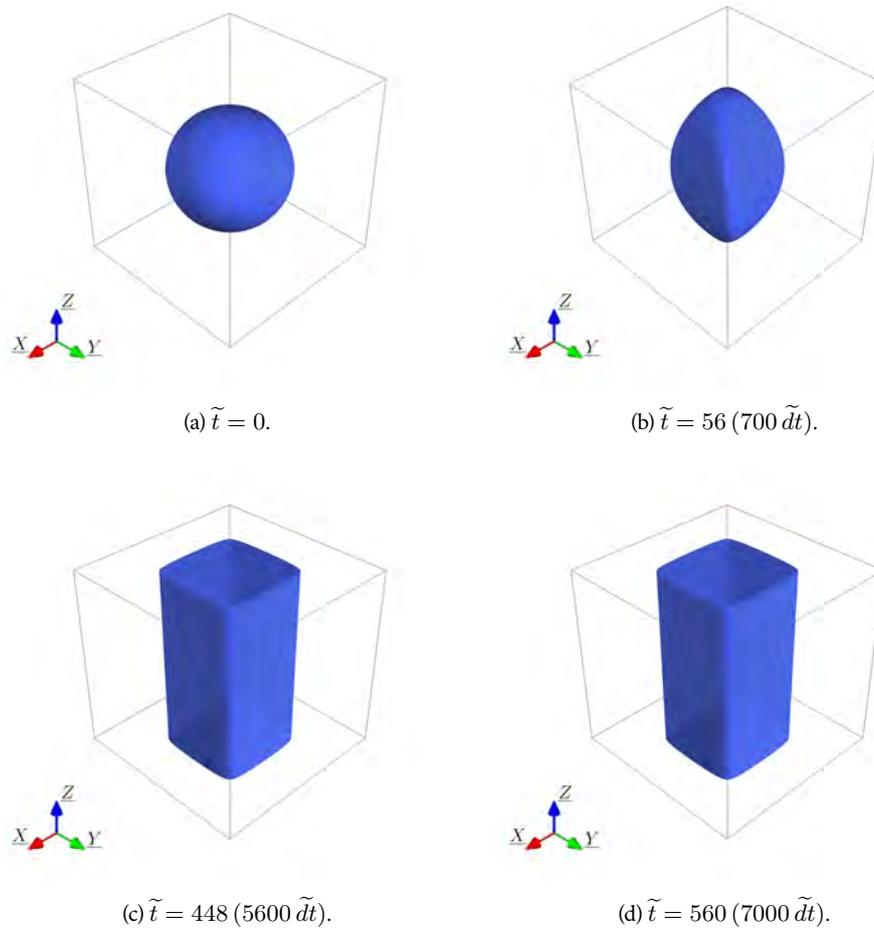


FIGURE 2.21 – Évolution de l'isosurface $\varphi = 0,5$ lors de la croissance d'un germe de macle $(332) [11\bar{3}]$ sphérique de rayon $R = 40$ nm soumis à un cisaillement appliqué $\gamma^{app} = 5\%$. Les axes X , Y et Z sont respectivement associés aux directions cristallographiques $\eta_1 = [11\bar{3}]$, $\underline{K}_1 = [332]$ et $\underline{P} = [1\bar{1}0]$. (a) et (b) montrent l'évolution de la morphologie du germe initial en début de transformation. (c) et (d) montrent qu'à partir d'un moment, l'évolution de la macle mécanique au sein de la matrice se stabilise ($\langle\varphi\rangle$ vaut $\sim 25\%$ dans les cas (c) et (d)).

saillement. L'interface que l'on retrouve le long de la direction de cisaillement $\eta_1^{(1)}$ ne serait alors pas cohérente. En revanche, l'interface parallèle au plan de maclage est considérée cohérente, ce qui induit une valeur d'énergie d'interface inférieure pour les interfaces normales à la direction $\underline{K}_1^{(1)}$ par rapport à celles normales à la direction $\eta_1^{(1)}$.

Pour rendre compte de ce phénomène à l'aide d'un modèle champ de phase similaire au modèle présenté dans les sections précédentes, il suffit d'utiliser un terme de gradient anisotrope dans la densité d'énergie f_{int} . L'énergie libre totale \mathcal{F} associée à un système biphasé, similaire au système étudié précédemment, est alors donnée par l'équation suivante :

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_{int} + \mathcal{F}_{el} = \int_{\Omega} \left[W g(\varphi) + \frac{\kappa_{ij}}{2} (\nabla\varphi)_i (\nabla\varphi)_j \right] dV + \mathcal{F}_{el}, \quad (2.76)$$

avec $\tilde{\kappa}$ un tenseur diagonal à coefficients positifs, exprimé dans le repère du variant de macle étudié :

$$\tilde{\kappa} = \begin{pmatrix} \kappa_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \kappa_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{33} \end{pmatrix}_{\mathcal{B}_1}. \quad (2.77)$$

On modifie alors l'équation (2.48) qui donne l'évolution du champ non-conservé $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ associé au variant de macle étudié. Adimensionnée, elle s'écrit :

$$\hat{\varphi}(\tilde{\underline{q}}, \tilde{t} + \tilde{dt}) = \frac{\hat{\varphi}(\tilde{\underline{q}}, \tilde{t}) - \tilde{dt} \mathcal{JF} \left\{ g'(\varphi) + \frac{\delta \tilde{\mathcal{F}}_{el}}{\delta \varphi} \right\}}{1 + \tilde{dt} \tilde{\kappa}_{ij} \tilde{q}_i \tilde{q}_j}, \quad (2.78)$$

où $\tilde{\kappa}_{ij} = \kappa_{ij}/(f_{ad} l_{ad})$. Ce type de modèle a été utilisé pour décrire la croissance anisotrope de macles mécaniques observées dans l'aluminium (c.f.c.) (Heo *et al.* [2011]) et le tantale (c.c.) (Gu *et al.* [2013]). Ceux-ci étudient le cas du maclage en 2 dimensions, dans le plan de cisaillement (plan de normale $\underline{P}^{(1)}$). Dans l'équation (2.76), ils choisissent des coefficients du tenseur $\tilde{\kappa}$ tels que $\kappa_{11} \gg \kappa_{22}$. Ce choix permet de considérer une énergie d'interface anisotrope : elle est plus importante dans la direction de cisaillement $\underline{\eta}_1^{(1)}$ que dans la direction normale au plan de maclage $\underline{K}_1^{(1)}$. En effet, l'équation (2.19) montre que si l'on considère un coefficient de gradient α anisotrope, l'énergie d'interface se retrouve anisotrope. Les valeurs d'énergie d'interface considérées dans les deux modèles cités se base sur des simulations atomistiques et sont de l'ordre de 1 J/m² dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ (γ_1) et de l'ordre de 0,1 J/m² dans la direction $\underline{K}_1^{(1)}$ (γ_2). Ce choix donne un ratio κ_{11}/κ_{22} de l'ordre de 100 ($\gamma \sim \sqrt{\kappa}$) pour Gu *et al.* [2013] ($\gamma_1/\gamma_2 \approx 10$), et de l'ordre de 1600 dans le cas de Heo *et al.* [2011] ($\gamma_1/\gamma_2 \approx 40$). Dans les deux cas, les résultats obtenus montrent évidemment des morphologies qui se rapprochent fortement de la morphologie des macles observées expérimentalement. Puisque cette approche est très utilisée dans la littérature, nous avons décidé de la mettre en œuvre pour le maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Cela nous permettra en particulier d'illustrer les limites d'une telle approche.

On retrouve dans le tableau 2.4 les paramètres en entrée de la simulation. Ceux-ci sont choisis de manière similaire à ceux de Heo *et al.* [2011]. Les valeurs γ_1 et γ_2 correspondent respectivement aux valeurs d'énergie d'interface calculées dans les directions $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$, relatives au variant (332) $[11\bar{3}]$, à l'aide de l'équation (2.19). Les données élastiques sont identiques à celles du tableau 2.3.

La boîte de simulation 2D correspond au plan de normale $\underline{P}^{(1)} = [1\bar{1}0]$. Contrairement aux cas 3D précédents, ici les directions $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$ sont tournés de 45° par rapport à l'axe $\underline{P}^{(1)}$ (voir figure 2.22a). Vingt germes de macle circulaires de rayon $R = 5$ nm sont placés de manière aléatoire au sein de la matrice. On considère des déformations appliquées en cisaillement d'amplitude $\gamma_{app} = 5\%$. La figure 2.22 montre l'évolution du champ $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ de sa configuration initiale à sa configuration d'équilibre finale, où l'on obtient une fraction volumique de macle de l'ordre de 28% (résultat en accord avec la figure 2.20). Du point de vue de la morphologie de la microstructure obtenue, on se rapproche fortement de ce qui est observé expérimentalement : des macles mécaniques sous forme de lamelles, allongées dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et peu épaisses dans la direction $\underline{K}_1^{(1)}$. Cependant, les figures 2.22b et 2.22c montre un comportement très anisotrope de l'interface, qui pousse le champ à croître dans la direction souhaitée.

Taille de la boîte de simulation (en nm)	$102,4 \times 102,4$
Pas de grille d (en nm)	0,2
Pas de temps adimensionné $\tilde{d}t$	1×10^{-2}
Pré-facteur double-puits W (en J/m ³)	1×10^9
Pré-facteur gradient κ_{11} (en J/m)	$7,2 \times 10^{-8}$
Pré-facteur gradient κ_{22} (en J/m)	$5,6 \times 10^{-11}$
γ_1 (en J/m ²)	2
γ_2 (en J/m ²)	56×10^{-3}

TABLEAU 2.4 – Paramètres numériques relatifs à la simulation présentée dans la Section 2.4.2.

En effet, on peut voir un étalement important de l'interface dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ en comparaison à ce que l'on voit dans la direction $\underline{K}_1^{(1)}$. La figure 2.23 montre le tracé des profils du champ $\varphi(\underline{X}, t)$ le long de $\underline{\eta}_1^{(1)}$ (en rose) et $\underline{K}_1^{(1)}$ (en vert), correspondant aux tracés de la même couleur sur la carte du champ de la figure 2.23.

On voit alors que l'on a bien 6 nœuds sur l'interface le long de la direction $\underline{K}_1^{(1)}$ (en rose). Cependant, on observe une interface mal définie dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ (en vert), avec plus de 150 nœuds à l'intérieur. Cela est facilement prévisible en observant les valeurs données sur les coefficients du gradient qui, comme vu dans la Section 2.1.1, influent directement sur le nombre de nœuds présents dans l'interface. On note que les valeurs de l'énergie d'interface entrées dans la simulation (tableau 2.4) sont toutes les deux inférieures à la valeur seuil d'énergie d'interface de 4 J/m^2 déterminée dans la Section 2.3.3, permettant de considérer une interface se rapprochant fortement d'un profil en tangente hyperbolique. Toutefois, l'étalement de l'interface dans la direction de la pointe est très problématique pour la simulation du maillage. En effet, pour que la simulation champ de phase décrive l'avancée d'une interface, il est nécessaire que l'épaisseur des interfaces soit plus petite que toutes les longueurs caractéristiques de la microstructure. En particulier, l'épaisseur des interfaces doit rester plus petite que le rayon de courbure de la pointe. Dans le cas présent, tout comme dans Heo *et al.* [2011] et Gu *et al.* [2013], cette condition n'est absolument pas remplie.

Dans les situations pour lesquelles l'anisotropie de l'énergie d'interface est importante, il apparaît donc nécessaire d'utiliser une approche différente. On s'intéresse dans le paragraphe suivant au développement d'un modèle capable de prendre en compte une énergie d'interface anisotrope tout en gardant une largeur d'interface constante.

2.4.3 Cas de l'énergie d'interface anisotrope et largeur d'interface constante

Dans la section précédente, on a mis en place un modèle permettant de générer une croissance anisotrope du variant de macle (332) $[11\bar{3}]$, favorisant un allongement dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Cependant,

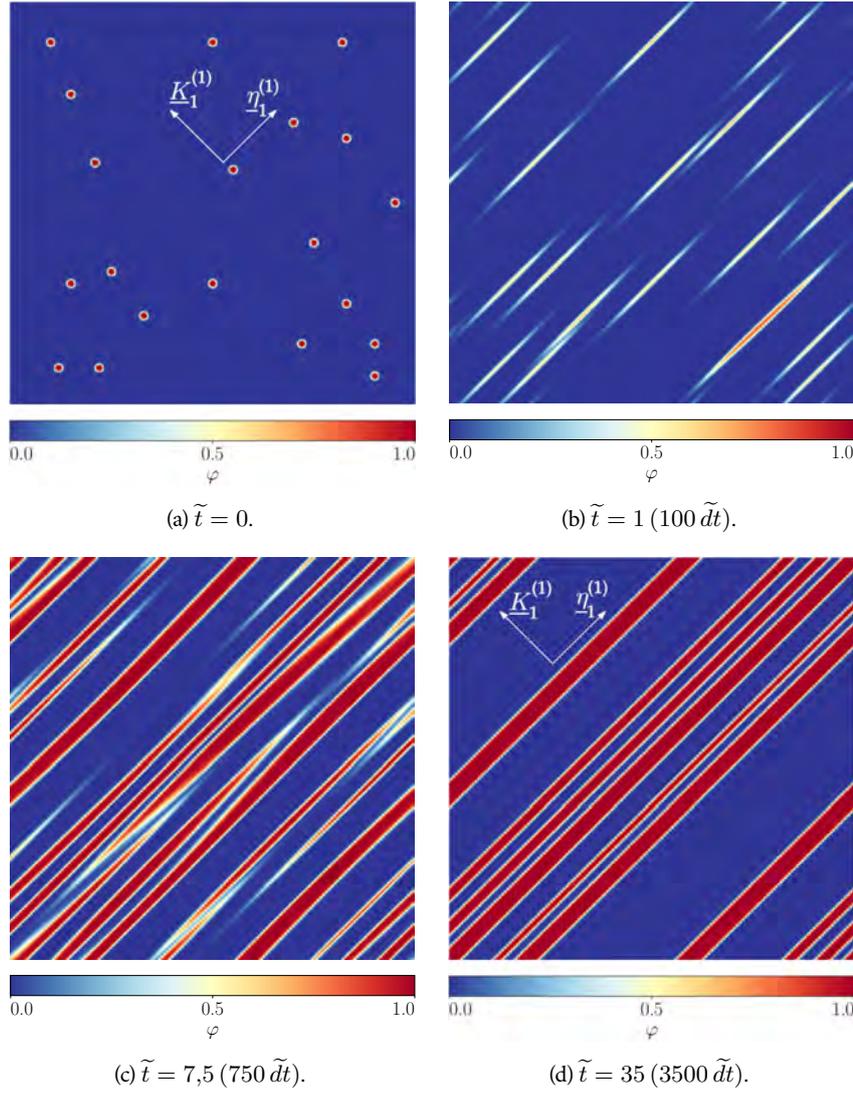
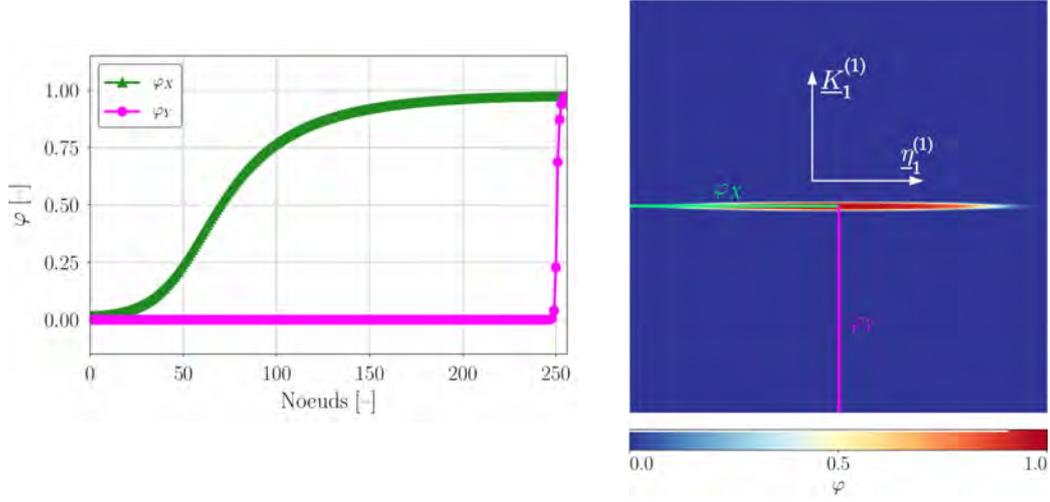


FIGURE 2.22 – Évolution du champ $\varphi(\mathcal{X}, t)$ quand l'énergie d'interface est rendue anisotrope à l'aide des facteurs de gradient anisotropes $\kappa_{11} \gg \kappa_{22}$. Conditions aux limites en cisaillement appliqué avec $\gamma^{app} = 5\%$. À $\tilde{t} = 35$, la fraction volumique de macles n'évolue plus et atteint une valeur de 28%.

cela n'a été possible qu'au détriment du comportement de l'interface : on comptait près de 150 nœuds dans l'interface dans la direction souhaitée. Dans cette section, on développe un modèle capable de rendre compte d'une énergie d'interface anisotrope tout en gardant une morphologie d'interface isotrope (c.-à-d. à largeur constante).

Pour cela, on s'intéresse à l'expression de la densité d'énergie f_{int} formulée dans l'équation (2.20). Cette expression avait pour paramètre l'énergie d'interface γ et la largeur de l'interface 2δ . Le découplage énergie d'interface/largeur d'interface permet alors de considérer une énergie d'interface anisotrope en conservant une largeur d'interface constante (Torabi *et al.* [2009]). En effet, on peut écrire :

$$f_{int} = 12 \frac{\gamma(\underline{n})}{\delta} g(\varphi) + \frac{3}{2} \delta \gamma(\underline{n}) |\nabla \varphi|^2, \quad (2.79)$$



(a) Comparaison des profils de φ le long de $\underline{\eta}_1^{(1)}$ (φ_X) et $\underline{K}_1^{(1)}$ (φ_Y) à $\tilde{t} = 2$.

(b) Carte du champ φ à $\tilde{t} = 2$. Les profils de φ le long des lignes magenta et verte sont tracés sur la figure 2.23a.

FIGURE 2.23 – Champ φ quand l'énergie d'interface est rendue anisotrope à l'aide des facteurs de gradient anisotropes $\kappa_{11} \gg \kappa_{22}$. (a) Comparaison des profils le long de $\underline{\eta}_1$ et \underline{K}_1 à $\tilde{t} = 2$ ($200 \tilde{dt}$). (b) Carte du champ φ à $\tilde{t} = 2$.

avec $\underline{n} = \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}$ le vecteur unitaire normal à l'interface macle-matrice.

Cette formulation implique que l'on modélise la valeur de l'énergie d'interface en fonction de la direction \underline{n} . Dans le cas étudié, le plus simple est de considérer une fonction $\gamma(\underline{n})$ associée au rayon d'un ellipsoïde de demi-axes respectifs Γ_1 , Γ_2 et Γ_3 dans les directions $\underline{\eta}_1^{(1)}$, $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{P}^{(1)}$ (voir figure 2.24). La fonction $\gamma(\underline{n})$ prend alors la forme suivante :

$$\gamma(\underline{n}) = \sqrt{\gamma_1^2(\underline{n}) + \gamma_2^2(\underline{n}) + \gamma_3^2(\underline{n})}, \quad (2.80)$$

où

$$\gamma_i(\underline{n}) = \Gamma_i (\underline{n} \cdot \underline{u}^{(i)}), \quad \text{avec } i = 1, 2, 3. \quad (2.81)$$

Les vecteurs $\underline{u}^{(i)}$ correspondent aux vecteurs directeurs unitaires dans les directions où les valeurs d'énergie d'interface Γ_i sont spécifiées. Dans le cas étudié, on a $\underline{u}^{(1)} = \underline{\eta}_1^{(1)}$, $\underline{u}^{(2)} = \underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{u}^{(3)} = \underline{P}^{(1)}$.

Il est maintenant nécessaire de recalculer la force motrice $\frac{\delta\mathcal{F}_{int}}{\delta\varphi}$ liée à la densité d'énergie d'interface. En rappelant que $\underline{n} = \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}$, la force motrice liée à \mathcal{F}_{int} s'écrit maintenant :

$$\frac{\delta\mathcal{F}_{int}}{\delta\varphi} = \frac{\partial f_{int}}{\partial\varphi} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial f_{int}}{\partial(\nabla\varphi)_i} \right], \quad (2.82)$$

avec

$$\frac{\partial f_{int}}{\partial\varphi} = \frac{12}{\delta} \gamma(\underline{n}) g'(\varphi), \quad (2.83)$$

et

$$\frac{\partial f_{int}}{\partial(\nabla\varphi)_i} = \frac{\partial}{\partial(\nabla\varphi)_i} \left\{ \gamma \left(\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} \right) \left[\frac{12}{\delta} g(\varphi) + \frac{3}{4} \delta |\nabla\varphi|^2 \right] \right\}. \quad (2.84)$$

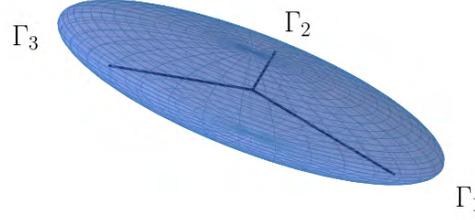


FIGURE 2.24 – Représentation schématique de la fonction énergie d'interface $\gamma(\underline{n})$ choisie. Γ_1 , Γ_2 et Γ_3 sont les valeurs d'énergie d'interface spécifiées selon 3 directions différentes de vecteurs directeurs respectifs $\underline{u}^{(1)}$, $\underline{u}^{(2)}$ et $\underline{u}^{(3)}$.

Le développement de l'équation (2.84) donne :

$$\frac{\partial f_{int}}{\partial(\nabla\varphi)_i} = \frac{\partial \gamma(\underline{n})}{\partial(\nabla\varphi)_i} \left[\frac{12}{\delta} g(\varphi) + \frac{3}{4} \delta |\nabla\varphi|^2 \right] + \frac{3}{2} \delta \gamma(\underline{n}) (\nabla\varphi)_i, \quad (2.85)$$

avec

$$\frac{\partial \gamma(\underline{n})}{\partial(\nabla\varphi)_i} = \frac{1}{|\nabla\varphi|^2} \frac{1}{\gamma(\underline{n})} \left\{ \sum_{j=1}^3 \Gamma_j^2 (\underline{n} \cdot \underline{u}^{(j)}) \left[u_i^{(j)} |\nabla\varphi| - (\nabla\varphi)_i (\underline{n} \cdot \underline{u}^{(j)}) \right] \right\}. \quad (2.86)$$

Le travail réalisé dans la Section 2.2.1 montre que la présence d'un terme linéaire en $\Delta\varphi$ dans la force motrice $\frac{\delta\mathcal{F}_{int}}{\delta\varphi}$ est très utile pour proposer un schéma semi-implicite afin d'intégrer la loi d'évolution du champ de phase. En effet, le terme en laplacien permet de considérer une partie linéaire en $\widehat{\varphi}(\underline{q})$ lorsque l'on passe dans l'espace de Fourier, et permet l'écriture d'un schéma semi-implicite. Dans ce but, on exprime l'énergie d'interface $\gamma(\underline{n})$ de la façon suivante :

$$\gamma(\underline{n}) = \gamma^{max} - \widetilde{\gamma}(\underline{n}), \quad (2.87)$$

où γ^{max} est la valeur maximale de $\gamma(\underline{n})$ et $\widetilde{\gamma}(\underline{n})$ l'écart de $\gamma(\underline{n})$ à sa valeur maximale. Dès lors, le second terme de l'équation (2.82) devient :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial f_{int}}{\partial(\nabla\varphi)_i} \right] = \frac{\partial}{\partial x_i} [A_i] + \frac{3}{2} \delta \gamma^{max} \Delta\varphi, \quad (2.88)$$

avec

$$A_i = \frac{\partial \gamma(\underline{n})}{\partial(\nabla\varphi)_i} \left[\frac{12}{\delta} g(\varphi) + \frac{3}{4} \delta |\nabla\varphi|^2 \right] - \frac{3}{2} \delta \widetilde{\gamma}(\underline{n}) (\nabla\varphi)_i. \quad (2.89)$$

De la même façon que dans la Section 2.2.1, la loi d'évolution est ainsi résolue à l'aide d'un schéma semi-implicite dans l'espace de Fourier. Ici, on obtient :

$$\widehat{\varphi}(\underline{q}, t + dt) = \frac{\widehat{\varphi}(\underline{q}, t) - L dt \left[\mathcal{F} \left\{ \frac{12}{\delta} \gamma(\underline{n}) g'(\varphi) + \frac{\delta\mathcal{F}_{el}}{\delta\varphi} \right\} - i q_j \mathcal{F} \{A_j\} \right]}{1 + \frac{3}{2} L dt \delta \gamma^{max} \underline{q}^2}, \quad (2.90)$$

avec sommation sur les indices j .

Contrairement à l'équation (2.48) donnant l'évolution de $\widehat{\varphi}$ dans le cas où l'énergie d'interface γ est isotrope, on voit qu'un terme supplémentaire est présent au numérateur (terme $i q_j \mathcal{F} \{A_j\}$). Comme

on peut le voir dans l'équation (2.89), ce terme est fonction de l'écart $\tilde{\gamma}(\underline{n})$ d'énergie d'interface à sa valeur maximale. Il est alors nul dans le cas où l'on considère une énergie d'interface isotrope, et prend de l'ampleur au fur et à mesure que le ratio d'anisotropie d'énergie d'interface s'accroît. Du fait que ce terme est au numérateur (c.-à-d. traité explicitement), il peut engendrer une déstabilisation, voire la divergence, du schéma numérique dans le cas d'une forte anisotropie d'énergie d'interface. La décomposition (2.87) permet d'ajouter du poids au dénominateur, en particulier sur les courtes longueurs d'onde, à l'aide du terme traité implicitement. Nous avons observé que cette approche permet de stabiliser le schéma numérique pour des pas de temps plus importants.

Pour rappel, les résultats de la Section 2.4 ont montré que la croissance du variant (332) $[11\bar{3}]$ est anisotrope dans la mesure où l'on obtient finalement une morphologie allongée dans la direction $\underline{P}^{(1)}$. On s'intéressera ici à la prise en compte d'une énergie d'interface anisotrope dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$, afin de favoriser l'obtention d'une plaquette allongée dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Un autre résultat important était la prise en compte d'une valeur d'énergie d'interface de l'ordre de 4 J/m^2 nécessaire à l'obtention d'une interface contrôlée (dans le cas d'une discrétisation spatiale $\Delta x = 1 \text{ nm}$). En se basant sur ces résultats, quatre simulations 2D dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$ sont considérées avec des ratios d'énergie d'interface $r_a = \Gamma_1/\Gamma_2$ égaux à 1 (énergie d'interface isotrope), 10, 15 et 20. Afin d'assurer un profil en tangente hyperbolique du champ de phase au travers de l'interface, la valeur minimale d'énergie d'interface Γ_2 est prise égale à 4 J/m^2 . Les conditions aux limites sont considérées en déformations appliquées avec un cisaillement donné par $\gamma^{app} = 7\%$. L'ensemble des données relatives à l'élasticité sont identiques aux cas précédents (voir tableau 2.3). Aussi, afin d'accélérer la croissance du germe initial, on choisit des morphologies initiales adaptées aux ratios d'énergie d'interface. En effet, en considérant des germes initiaux circulaires, la croissance n'a lieu qu'après un temps lié à la modification de la morphologie du germe initial (voir figure 2.16). Les paramètres numériques relatifs aux quatre simulations sont résumés dans le tableau 2.5. Les vecteurs $\underline{u}^{(1)}$ et $\underline{u}^{(2)}$ de l'équation (2.81) sont respectivement pris égaux aux vecteurs unitaires $\tilde{\underline{\eta}}_1^{(1)}$ et $\tilde{\underline{K}}_1^{(1)}$.

Taille de la boîte de simulation (en nm)	256×256
Pas de grille d (en nm)	1
Largeur d'interface adimensionnée $\tilde{\delta}$	6
Énergie d'interface Γ_1 (en J/m^2)	4, 40, 60 ou 80
Énergie d'interface Γ_2 (en J/m^2)	4

TABLEAU 2.5 – Paramètres numériques généraux relatifs aux quatre simulations présentées dans la Section 2.4.3.

Adimensionnement du problème

Le modèle développé dans cette section présente une formulation différente de celui rencontré dans les sections précédentes. En effet, la densité d'énergie f_{int} n'est plus formulée à l'aide d'un terme

de gradient anisotrope, mais inclut explicitement une dépendance avec la direction du gradient local du champ. Les grandeurs caractéristiques utilisées pour l'adimensionnement dans le [tableau 2.1](#) sont alors modifiées. Les nouvelles valeurs prises en compte sont spécifiées dans le [tableau 2.6](#).

Densité d'énergie caractéristique f_{ad} (en J/m^3)	$\max \{\Gamma_i\} / \delta$
Longueur caractéristique l_{ad} (en m)	d
Temps caractéristique t_{ad} (en s)	$\frac{1}{L f_{ad}}$

TABLEAU 2.6 – Grandeurs caractéristiques utilisées pour l'adimensionnement.

La valeur de la densité d'énergie libre caractéristique f_{ad} est à présent égale à $\max \{\Gamma_i\} / \delta$, où le numérateur est égal au rayon maximal de l'ellipsoïde $\gamma(\underline{n})$ considéré (voir [figure 2.24](#)). Cela implique une variation de l'échelle de temps caractéristique t_{ad} en fonction de $\max \{\Gamma_i\}$, échelle permettant d'adimensionner le pas de temps dt (voir équations (2.54)). Nous avons ainsi observé que la stabilité du schéma d'intégration temporel dépendait fortement du ration d'anisotropie r_a .

Le [tableau 2.7](#) regroupe les différents paramètres des quatre simulations étudiées dans cette section, avec la valeur de pas de temps que nous avons choisie. Les dimensions des germes initiaux sont données dans le format $\underline{\eta}_1^{(1)} \times \underline{K}_1^{(1)}$.

	Simu. 1	Simu. 2	Simu. 3	Simu. 4
Ratio r_a	1	10	15	20
Germe initial (nm)	12×12	60×6	90×6	120×6
Pas de temps adim. \tilde{dt}	8×10^{-2}	1×10^{-2}	5×10^{-3}	5×10^{-3}

TABLEAU 2.7 – Paramètres spécifiques aux quatre simulations présentées dans la [Section 2.4.3](#).

Résultats obtenus

L'évolution du champ φ associé au variant de macle (332) $[11\bar{3}]$ est montrée sur la [figure 2.25](#). La simulation 1 montre l'évolution d'un germe circulaire dans le cas d'une énergie d'interface isotrope ($\Gamma_1 = \Gamma_2$). On voit que le résultat obtenu est en bon accord avec les résultats de la [Section 2.4.1](#) : on obtient en fin de simulation une morphologie carrée, avec des interfaces normales aux directions $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$. Dans le cas des simulations 2 et 3, on voit qu'une énergie d'interface Γ_1 10 à 15 fois supérieure à Γ_2 provoquent l'obtention de plaquettes qui croissent dans la direction de cisaillement $\underline{\eta}_1^{(1)}$. L'augmentation du ratio r_a permet l'obtention d'une macle plus "pointue" dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Or, plus la macle croît, plus l'effet de l'énergie élastique se fait sentir avec l'apparition d'une interface normale à $\underline{\eta}_1^{(1)}$ qui apparaît et vient contrecarrer l'effet de l'énergie d'interface dans cette direction (visible sur les

figures 2.25i à 2.25l). Pour les derniers temps de simulation présentés dans la figure 2.25, la forme de la pointe peut également être impactée par l'interaction de la macle avec ses images périodiques.

Les résultats de la simulation 4 montrent une morphologie plus allongée que dans les simulations 2 et 3, avec une apparition plus tardive de l'interface normale à $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Cependant, on note que l'apparition de cette interface déstabilise le champ φ en pointe de macle, comme on peut le voir sur la figure 2.25l. En s'intéressant à l'apparition de ces oscillations à l'interface (qui ne provoquent pas la divergence du schéma numérique temporel), on remarque que ce phénomène est dû au calcul numérique de la normale. En effet, le calcul du champ des normales \underline{n} nécessite le calcul du rapport entre $\nabla\varphi$ et sa norme $|\nabla\varphi|$, qui provoque l'apparition de valeurs indésirables en dehors de l'interface (où $\nabla\varphi$, qui est en principe nul, est de l'ordre de 10^{-8} numériquement). L'amplitude de ces valeurs se retrouve multipliée par la plus haute valeur d'énergie d'interface, en pointe de macle, et ceci conduit à une contribution non négligeable au terme moteur A_i (voir équation (2.89)). Dès lors, on voit apparaître des oscillations du champ φ en pointe de macle dans les cas où le ratio d'énergie d'interface r_a devient supérieur à 15. Il s'agit là d'une des limites du modèle, liée au calcul numérique du champ des normales \underline{n} .

Une deuxième limite est la stabilité du schéma temporel semi-implicite qui se dégrade à mesure que l'on augmente le ratio d'énergie d'interface r_a . Si le traitement implicite d'une partie de la force motrice (voir Section 2.4.3) a permis d'améliorer sensiblement la stabilité du schéma initial, un travail reste à faire pour améliorer encore le schéma d'intégration pour les valeurs de r_a élevées.

En résumé, ces résultats ont montré qu'il est possible de considérer une énergie d'interface anisotrope tout en considérant une largeur d'interface constante, dans la mesure où le ratio d'énergie d'interface reste inférieur à 15. De plus, nous avons évalué l'importance du rôle de l'énergie élastique sur la morphologie de la macle. En effet, quand l'énergie d'interface est isotrope (simulation 1), des facettes perpendiculaires à $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$ sont observées. Il en est de même quand l'énergie d'interface est anisotrope (à la fin des simulations 2, 3 et 4, figures 2.25i à 2.25l). Cela indique que le rôle de l'anisotropie de l'énergie élastique est prépondérant dans les différentes simulations lancées. La section suivante est alors dédiée à l'étude du rôle de l'anisotropie de l'énergie élastique dans l'obtention d'une morphologie lamellaire des macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$.

2.4.4 Rôle de l'anisotropie de l'énergie élastique

Les effets de l'énergie élastique sur la croissance d'un variant de macle $(332) [11\bar{3}]$ ont été présentés dans les sections précédentes. Dans le cas où l'énergie d'interface est isotrope (Sections 2.3 et 2.4.1), ses effets sont notamment l'apparition de facettes de normales $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$, ainsi qu'une croissance favorisée dans la direction $\underline{P}^{(1)}$. On obtient ainsi, à partir d'un germe de macle initial sphérique, une croissance en aiguille à section carrée que l'on soit en déformations ou en contraintes appliquées (voir figures 2.17 et 2.21). Dans cette section, on s'intéresse à l'influence de l'énergie élastique sur la morphologie de la macle.

La démarche que nous allons suivre est similaire à celle développée par Cottura *et al.* [2014] ou Lebbad [2018] pour l'analyse des structures de Windmanstätten.

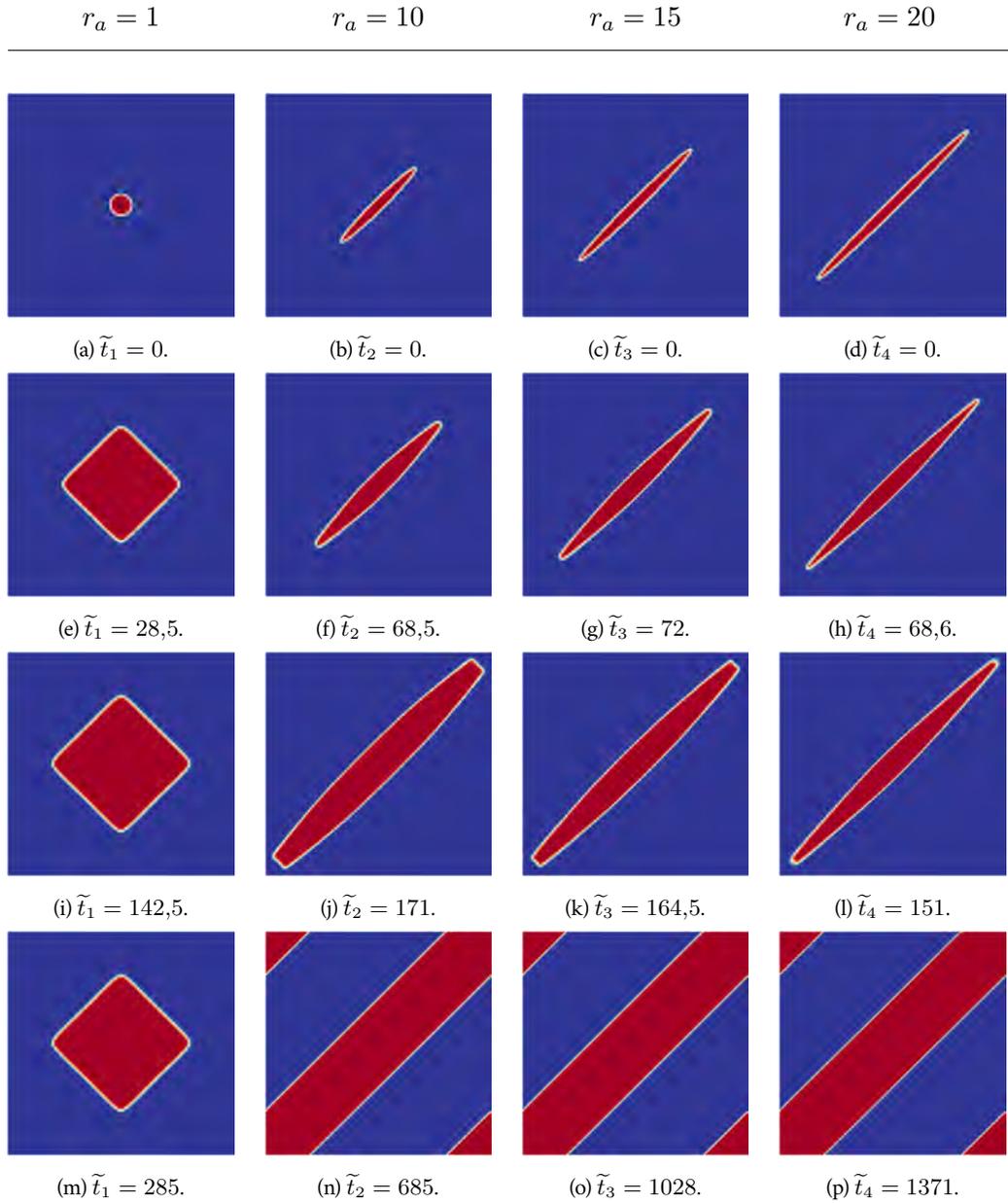
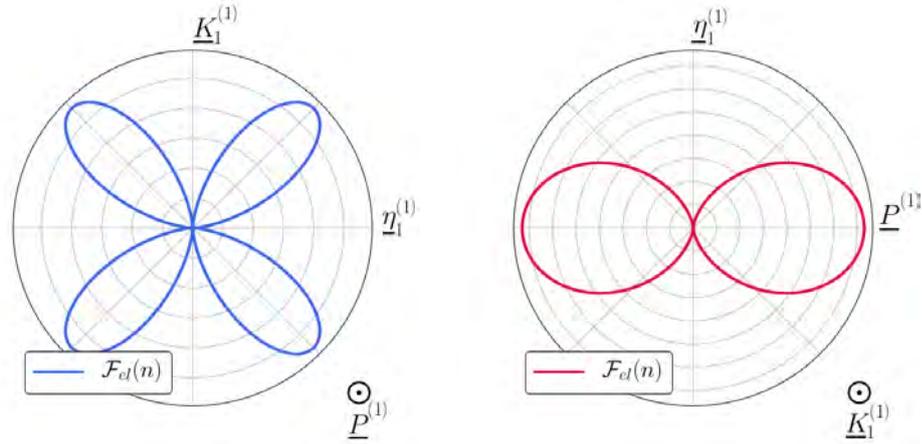


FIGURE 2.25 – Évolution du champ φ en fonction du ratio d'anisotropie de l'énergie d'interface $r_a = \Gamma_1/\Gamma_2$ avec largeur d'interface constante. Le ratio r_a associé à chaque simulation (colonne) est spécifié au dessus de la figure. Les indices i associés aux temps \tilde{t}_i correspondent aux 4 simulations décrites dans le [tableau 2.7](#) (temps caractéristiques t_{ad} différents). Les lignes correspondent à des temps de simulation différents.

Dans cette approche, l'anisotropie élastique est évaluée en utilisant une configuration simplifiée composée d'une macule de forme lamellaire dont on fait varier l'orientation. Ainsi, on s'intéresse à l'énergie élastique d'un système biphasé composé d'une lamelle de normale \underline{n} au sein d'une matrice de même composition.

Les constantes élastiques sont ici considérées homogènes et isotropes. Le tenseur de déformation libre caractéristique du variant de macule $(332) [11\bar{3}]$, défini dans l'équation (2.36), est associé à la lamelle. Il s'agit alors du seul élément pouvant induire une anisotropie dans l'énergie élastique. L'équilibre mé-



(a) Coupe perpendiculaire à $\underline{P}^{(1)}$ de $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$. (b) Coupe perpendiculaire à $\underline{K}_1^{(1)}$ de $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$.

FIGURE 2.26 – Représentation polaire de l'énergie élastique $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ d'une macle de morphologie lamellaire, de normale \underline{n} . (a) Tracé de $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$. (b) Tracé de $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ dans le plan de normale $\underline{K}_1^{(1)}$.

canique est ensuite résolu en considérant des conditions aux limites en contraintes appliquées nulles (c.-à-d. $\langle \sigma \rangle = 0$). Dans le cas considéré, les tenseurs de déformations et de contraintes sont homogènes par phase (macle ou matrice), et il est possible de calculer analytiquement l'énergie élastique dans le système (Khachaturyan [1983]).

On se place de nouveau dans la base \mathcal{B}_1 liée au variant de macle (332) [11 $\bar{3}$]. Le calcul de l'énergie élastique est réalisé pour différentes orientations \underline{n} de l'espace. La valeur de l'énergie élastique \mathcal{F}_{el} en fonction de la normale \underline{n} est représentée sur la figure 2.26 dans les deux plans d'intérêt étudiés dans ce chapitre : le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$ et le plan de normale $\underline{K}_1^{(1)}$ (l'énergie élastique représentée dans le plan de normale $\underline{\eta}_1^{(1)}$ est identique à ce dernier). On voit que la formation d'une interface perpendiculaire à $\underline{P}^{(1)}$ coûterait une énergie élastique importante, tandis que des interfaces normales à $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$ coûtent, elles, peu d'énergie. Aussi, on observe que l'énergie élastique est minimale pour deux directions (et leurs opposées) : $\underline{n} = \underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{n} = \underline{K}_1^{(1)}$. De plus, on note que ces valeurs minimales sont nulles dans le cas de contraintes appliquées nulles, ce qui veut dire que les lamelles ainsi orientées accommodent entièrement les déformations dans le système : les plans de normales $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$ sont donc des plans d'habitat du variant de macle (332) [11 $\bar{3}$] (interfaces macle-matrice cohérentes), et une microstructure ne contenant que des plans d'une seule de ces familles relaxe totalement son énergie élastique.

En se basant sur ces observations, nous comprenons pourquoi il est possible d'obtenir une morphologie de macle lamellaire dans une simulation 2D caractérisée par une invariance des champs le long de $\underline{P}^{(1)}$. Les directions $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$ sont toutes les deux favorables à la croissance d'une macle puisque chacune permet de générer une interface, perpendiculaire au plan $\underline{P}^{(1)}$, le long de laquelle l'énergie élastique est totalement relaxée. La coexistence de ces deux solutions quand l'élasticité est traitée en géométrie linéaire est rendue possible pour une raison simple. En géométrie linéaire, les éléments cristallographiques qui définissent le système de maillage, c'est-à-dire la direction de cisaillement $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et la normale au plan de maillage $\underline{K}_1^{(1)}$, interviennent de manière symétrique puisque le tenseur de dé-

formation propre $\underline{\varepsilon}^0$, produit tensoriel symétrisé de $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$, est le seul ingrédient pour lequel la cristallographie du maillage entre dans la formulation de l'énergie élastique. Conjugué au fait que le tenseur des constantes élastiques ici utilisé est isotrope, cette propriété de symétrie entre $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$ génère une équivalence entre les deux structures lamellaires décrites ci-dessus.

Considérons maintenant une configuration initiale qui permet de briser la symétrie entre $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$: on place un germe initial ellipsoïdal dans une section de normale $\underline{P}^{(1)}$, allongé le long de $\underline{\eta}_1^{(1)}$ (voir [figure 2.27a](#)). En d'autres termes, on considère le même modèle que celui utilisé dans la [Section 2.4.1](#), avec un germe de macle (332) $[11\bar{3}]$ initial pré-orienté dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Des conditions aux limites en déformations appliquées de cisaillement, avec $\gamma^{app} = 4\%$, sont imposées. Les paramètres d'entrée de la simulation sont présentés dans le [tableau 2.8](#). Les données élastiques sont identiques à celles du [tableau 2.3](#), et l'énergie d'interface est isotrope.

Taille de la boîte de simulation (en nm)	512×512
Pas de grille d (en nm)	1
Pas de temps adimensionné \tilde{dt}	8×10^{-2}
Largeur d'interface adimensionnée $\tilde{2\delta}$	6
Pré-facteur double-puits W (en J/m ³)	$1,6 \times 10^{10}$
Pré-facteur gradient α (en J/m)	$1,8 \times 10^{-8}$
Énergie d'interface γ (en J/m ²)	4

TABLEAU 2.8 – Paramètres généraux introduits des simulations présentées dans la [Section 2.4.4](#).

Le germe initial présente un rapport d'aspect égal à 10. La [figure 2.27](#) montre l'évolution du champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ associé au variant de macle (332) $[11\bar{3}]$. On voit alors que l'on obtient une croissance anisotrope avec une interface contrôlée qui garde la même épaisseur au cours de l'évolution. On note également que la valeur du cisaillement appliqué γ^{app} nécessaire à la croissance du variant de macle est inférieure aux valeurs choisies dans le cas d'un germe initial sphérique (3D) ou dans le cas où l'énergie d'interface est anisotrope (γ^{app} de l'ordre de 7%).

Ce résultat montre donc qu'en considérant un modèle avec énergie d'interface isotrope et un germe de macle initial allongé dans la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$, on peut obtenir la croissance d'un variant de macle sous la forme d'une lamelle allongée dans la direction de maillage $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Cependant, en se basant sur la symétrie induite par la théorie géométriquement linéaire et les résultats de la [figure 2.26](#), on peut imaginer qu'une croissance le long de la direction $\underline{K}_1^{(1)}$, perpendiculairement à $\underline{\eta}_1^{(1)}$, est également possible. On aperçoit les prémices de cela sur la [figure 2.27b](#), où la terminaison d'une lamelle adopte une forme plate perpendiculaire à $\underline{\eta}_1^{(1)}$.

La simulation précédente est alors relancée avec un germe de macle initial allongé maintenant le long de la direction $\underline{K}_1^{(1)}$. La [figure 2.28](#) montre l'évolution de la microstructure obtenue. Cette fois, on

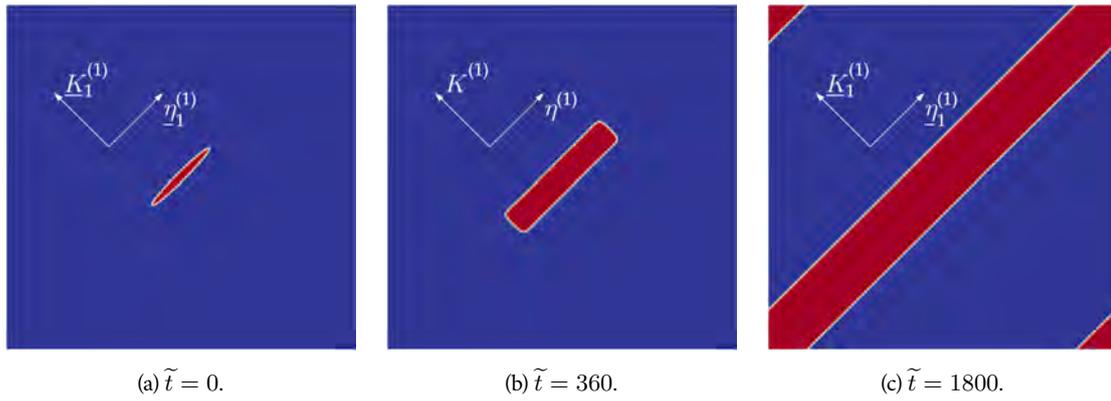


FIGURE 2.27 – Évolution du champ φ quand l'énergie d'interface est isotrope avec $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ et un cisaillement appliqué $\gamma^{app} = 4\%$. Ici, le germe initialement allongé le long de la direction de maillage $\underline{\eta}_1$ présente des faces principales parallèles au plan de maillage.

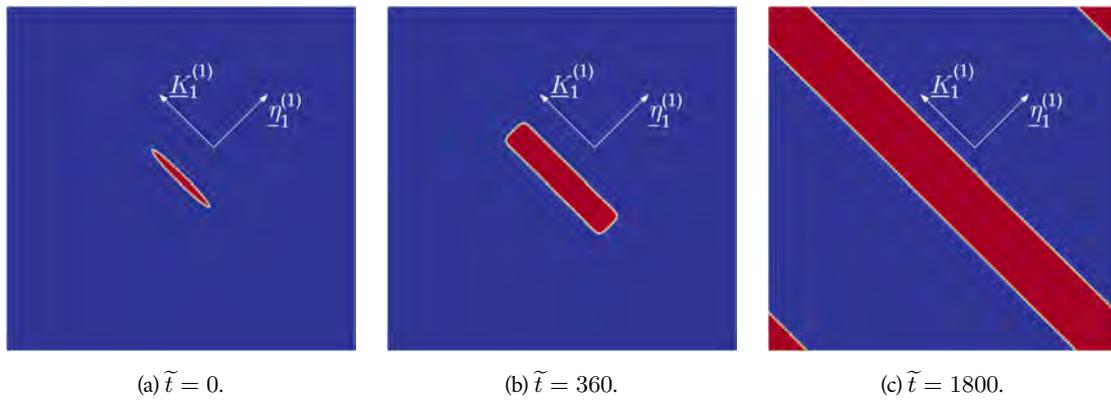


FIGURE 2.28 – Évolution du champ φ quand l'énergie d'interface est isotrope avec $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ et un cisaillement appliqué $\gamma^{app} = 4\%$. Ici, le germe initialement allongé le long de la direction normale au plan de maillage \underline{K}_1 présente des faces principales perpendiculaires à la direction de cisaillement $\underline{\eta}_1$.

note une croissance miroir de la précédente, favorisant la présence d'une interface normale à la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Ce résultat prouve bien que l'anisotropie de l'énergie élastique joue un rôle important dans la croissance d'un variant de macle $(332) [11\bar{3}]$: la direction de croissance observée est directement liée à la présence de l'interface macle-matrice permettant de relaxer totalement l'énergie élastique. Cependant, la croissance favorisant la présence de l'interface normale à la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ n'est pas observée expérimentalement. Le présent modèle, basé seulement sur l'anisotropie de l'énergie élastique et formulé dans un cadre géométriquement linéaire, ne rend donc pas totalement compte des microstructures de macle observées expérimentalement.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, les fondamentaux du formalisme champ de phase avec interface diffuse ont tout d'abord été définis et détaillés dans le cas de l'étude de l'évolution d'un champ non-conservé. Dans sa formulation la plus simple (potentiel double-puits quadratique), le modèle génère des interfaces loca-

lisées dont le profil est en tangente hyperbolique. En l'absence de forces motrices d'origine élastique, nous avons vu l'importance de discrétiser l'interface sur au moins 6 nœuds pour éviter le phénomène de frottement sur réseau.

Par la suite, on associe ce champ de phase à la présence d'un variant de macle (332) $[11\bar{3}]$ au sein d'une matrice représentative du matériau β -titane étudié. On s'est intéressé à l'impact de l'énergie élastique sur la morphologie de l'interface séparant le variant de macle (332) $[11\bar{3}]$ de la matrice. L'effet de l'ajout de l'énergie élastique dans le modèle provoque l'étalement de l'interface dans la direction où l'énergie élastique est la plus forte. Le profil de l'interface s'éloigne alors du profil en tangente hyperbolique attendu, et la microstructure ne peut plus être bien définie. Dans la [Section 2.3](#), on a montré qu'il était important de considérer une énergie d'interface suffisamment élevée pour atténuer l'effet de l'énergie élastique sur l'interface. Cela a finalement permis de retrouver un profil d'interface macle-matrice proche d'une tangente hyperbolique et une résolution bien définie (avec au moins 6 nœuds dans l'interface).

Une fois le modèle correctement paramétré, on s'aperçoit qu'un germe de de macle (332) $[11\bar{3}]$, initialement sphérique, croît dans la matrice sous l'effet d'une contrainte/déformation extérieure. Dans le cas de déformations appliquées, on montre qu'il est possible de prédire la valeur de fraction volumique finalement atteinte. La morphologie de la macle finalement obtenue est sous forme d'aiguille à section carrée. Cette morphologie ne correspondant pas aux observations expérimentales, on s'intéresse à la considération d'une possible énergie d'interface anisotrope, souvent introduite dans la littérature ([Clayton et Knap \[2011a\]](#), [Heo et al. \[2011\]](#), [Liu et al. \[2018b\]](#) ou encore [Gu et al. \[2013\]](#)) pour expliquer les morphologies anisotropes observées expérimentalement. On montre que la manière classique, basée sur l'anisotropie du terme de gradient, induit une interface qui s'élargit (exagérément) dans la direction souhaitée ([Section 2.5](#)).

En vue d'améliorer ce type de modèle en suivant la démarche proposée dans [Torabi et al. \[2009\]](#), on développe un modèle capable de rendre compte d'une énergie d'interface anisotrope tout en gardant une interface localisée et avec une largeur constante quelque soit sa direction. Cependant, la mise en œuvre numérique de ce modèle est délicate lorsque les ratios d'anisotropie de l'énergie d'interface sont importants. Dans les schémas d'intégration spectraux semi-implicite que nous avons utilisés, la stabilité du schéma décroît fortement quand on augmente l'anisotropie de l'énergie d'interface. Aussi, nous avons discuté de la difficulté à estimer localement et avec suffisamment de précision la normale aux surfaces $\varphi = \text{cste}$ en dehors de l'interface, puisque cette normale \underline{n} , définie par $\underline{n} = \frac{\nabla\varphi}{\|\nabla\varphi\|}$, nécessite le calcul d'un rapport numériquement délicat.

Finalement, en repartant du modèle initial avec énergie d'interface isotrope, on montre que l'énergie élastique est suffisante pour provoquer la croissance anisotrope d'un germe de macle initialement non sphérique. Cependant, ce modèle présente un défaut puisque l'anisotropie de l'énergie élastique induite par la présence du tenseur de déformation libre possède deux minima globaux : l'un favorisant la présence d'interfaces parallèles au plan de maclage et l'autre la présence d'interfaces normales à la

direction de cisaillement. Ainsi, un germe initial allongé, parallèle au plan de maclage, croît dans la direction de cisaillement pour former une microstructure lamellaire semblable aux observations expérimentales. Mais un germe initial allongé dans la direction normale au plan de maclage croît dans cette même direction. Au final, cela crée une microstructure non représentative de ce qui est réellement observé.

Deux options permettant de voir se développer les variants de macles corrects du point de vue cristallographique peuvent alors être envisagées. La première consiste en la prise en compte d'une énergie d'interface anisotrope, comme analysé précédemment dans les Sections 2.4.2 et 2.4.3. Cette approche permettrait évidemment de briser facilement la symétrie entre les interfaces perpendiculaires respectivement aux directions $\eta_1^{(1)}$ et $K_1^{(1)}$. Nous pensons que cette démarche aurait un caractère assez artificiel, d'autant plus que le modèle utilisé jusqu'ici souffre d'une approximation importante : l'élasticité est formulée en petite déformation, bien que les microstructures que l'on souhaite étudier sont associées à des tenseurs de déformation propres importants.

Ceci nous amène à la seconde option que l'on souhaite étudier et qui consiste à considérer une énergie élastique linéaire formulée en grande déformation, c'est à dire dans le cadre géométriquement non-linéaire. L'importance d'une formulation en grande déformation pour étudier les microstructures associées aux transformations displacives a été montrée, en particulier pour les transformations martensitiques, dans les travaux de [Salman \[2009\]](#) et [Salman *et al.* \[2019\]](#). On s'intéresse donc, dans la suite de ces travaux, au même problème physique mais en considérant cette fois un cadre géométriquement non-linéaire.

La considération de l'élasticité dans un cadre géométriquement non-linéaire nécessite la mise en place d'un algorithme permettant de résoudre l'équilibre mécanique dans ce cadre là. Le chapitre suivant est dédié à la présentation du cadre géométriquement non-linéaire étudié ainsi qu'au développement et à l'implémentation d'un solveur mécanique basé sur une méthode spectrale associé au problème non-linéaire. Des cas-tests sont également présentés avant de s'intéresser au problème du maclage mécanique $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans le cadre géométriquement non-linéaire ([Chapitre 4](#)).

CHAPITRE

3

SOLVEUR MÉCANIQUE PAR MÉTHODE SPECTRALE DANS LE CADRE GÉOMÉTRIQUEMENT NON-LINÉAIRE

Sommaire

2.1	Formalisme champ de phase	36
2.1.1	Profil d'un champ de phase à l'équilibre	38
2.1.2	Énergie d'interface	39
2.1.3	Loi d'évolution : modèle champ de phase de type Allen-Cahn	40
2.2	Modèle champ de phase de type Allen-Cahn couplé à l'élasticité : cadre géométriquement linéaire	42
2.2.1	Résolution numérique de la loi d'évolution du champ de phase	44
2.2.2	Adimensionnement du problème	45
2.3	Implémentation numérique et résultats préliminaires	46
2.3.1	Sans prise en compte de l'énergie élastique	47
2.3.2	Avec prise en compte de l'énergie élastique	49
2.3.3	Stabilité du profil en tangente hyperbolique	52
2.4	Étude de la croissance d'un variant de maclé $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$	58
2.4.1	Cas de l'énergie d'interface isotrope	58
2.4.2	Cas de l'énergie d'interface anisotrope	66
2.4.3	Cas de l'énergie d'interface anisotrope et largeur d'interface constante	69
2.4.4	Rôle de l'anisotropie de l'énergie élastique	75
2.5	Conclusion	79

Dans ce chapitre, on s'intéresse à la résolution de l'équilibre mécanique qui sera utilisé dans le modèle champ de phase du maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ en grandes déformations (Chapitre 4). Dans un premier temps, on introduit le formalisme ainsi que les hypothèses utilisées pour la mise en place de l'algorithme (Section 3.1). L'algorithme proprement dit est présenté dans la Section 3.2, ainsi que des applications à des cas-tests (Section 3.3) pour différentes conditions aux limites.

3.1 Modèle élastique en grande déformation

Sans perte de généralité concernant l'écriture du solveur numérique grande déformation présenté plus loin, nous considérons un matériau hyperélastique : l'énergie élastique (libre) est donnée par un potentiel qui dépend de l'état de déformation local. Il existe donc une configuration de référence privilégiée à partir de laquelle on peut représenter un état de déformation quelconque. Nous continuons donc à travailler avec des grandeurs lagrangiennes : $\underline{x}(\underline{\mathcal{X}})$ représente, dans la déformation courante, la position d'un point matériel de position $\underline{\mathcal{X}}$ dans la configuration de référence. Le champ de déplacement $\underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$ est comme d'habitude défini par :

$$\underline{x}(\underline{\mathcal{X}}) = \underline{\mathcal{X}} + \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}). \quad (3.1)$$

L'énergie élastique ne pouvant dépendre que des variations spatiales de \underline{x} , nous introduisons le tenseur gradient de transformation $\underline{\tilde{F}}(\underline{\mathcal{X}})$:

$$\underline{\tilde{F}}(\underline{\mathcal{X}}) = \frac{\partial \underline{x}(\underline{\mathcal{X}})}{\partial \underline{\mathcal{X}}}, \quad (3.2)$$

que l'on peut donc écrire sous la forme :

$$\underline{\tilde{F}}(\underline{\mathcal{X}}) = \underline{\mathbb{I}} + \frac{\partial \underline{u}(\underline{\mathcal{X}})}{\partial \underline{\mathcal{X}}}. \quad (3.3)$$

Dans le problème qui nous intéresse ici, l'état de déformation local résulte d'un mécanisme de maillage, auquel est associé un gradient de transformation $\underline{\tilde{F}}^*$, et d'une déformation élastique résiduelle. Nous choisissons de décrire cette situation en utilisant la décomposition multiplicative usuelle :

$$\underline{\tilde{F}} = \underline{\tilde{F}}^e \cdot \underline{\tilde{F}}^*, \quad (3.4)$$

où le gradient de transformation $\underline{\tilde{F}}^e$ représente la déformation élastique. L'énergie élastique résiduelle ne dépendra donc que de la composante $\underline{\tilde{F}}^e$. Enfin, puisque le modèle doit être invariant par rotation, cette énergie élastique ne doit dépendre de $\underline{\tilde{F}}^e$ que par l'intermédiaire du tenseur de Cauchy-Green élastique \underline{C}^e ¹, défini par :

$$\underline{C}^e = \underline{\tilde{F}}^{eT} \cdot \underline{\tilde{F}}^e. \quad (3.11)$$

1. Cette propriété se démontre facilement :

l'invariance par rotation de la densité d'énergie élastique impose, quelque soit la rotation \underline{Q} , la relation suivante :

$$f_{el}^{int}(\underline{\tilde{F}}^e) = f_{el}^{int}(\underline{Q} \cdot \underline{\tilde{F}}^e). \quad (3.5)$$

Cette relation est trivialement vérifiée si $f_{el}^{int}(\underline{\tilde{F}}^e)$ est de la forme suivante :

$$f_{el}^{int}(\underline{\tilde{F}}^e) = f(\underline{\tilde{F}}^{eT} \cdot \underline{\tilde{F}}^e). \quad (3.6)$$

Nous utilisons ici un modèle d'énergie élastique simplement quadratique. La densité d'énergie élastique $f_{el}^{int}(\underline{\xi}^e)$ ² a donc la forme suivante :

$$f_{el}^{int}(\underline{\xi}^e) = \frac{1}{2} \underline{\xi}^e : \underline{\lambda} : \underline{\xi}^e, \quad (3.12)$$

où $\underline{\xi}^e$ est le tenseur de déformation élastique de Green-Lagrange, relié à \underline{Q}^e par :

$$\underline{\xi}^e = \frac{1}{2} (\underline{Q}^e - \mathbb{I}). \quad (3.13)$$

Le tenseur des constantes élastiques $\underline{\lambda}$ peut, en toute généralité, dépendre de paramètres d'ordre qui décrivent localement l'état cristallographique du matériau, comme ici les champs $\varphi^{(i)}$ associés aux différentes macles. Enfin, nous notons $\mathcal{F}_{el}^{int}(\{\underline{\xi}^e\})$ l'énergie élastique totale :

$$\mathcal{F}_{el}^{int}(\{\underline{\xi}^e\}) = \int_{\Omega} f_{el}^{int}(\underline{\xi}^e) dV. \quad (3.14)$$

Dans la suite, nous souhaiterons éventuellement contrôler le système en imposant un gradient de transformation moyen $\langle \underline{F}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle$. Il est alors utile de faire apparaître explicitement $\langle \underline{F}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle$ dans l'expression des degrés de liberté $\underline{x}(\underline{\mathcal{X}})$. Nous écrivons donc :

$$\underline{x}(\underline{\mathcal{X}}) = \langle \underline{F} \rangle \cdot \underline{\mathcal{X}} + \delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}), \quad (3.15)$$

ou, de manière équivalente :

$$\underline{F}(\underline{\mathcal{X}}) = \langle \underline{F} \rangle + \delta \underline{F}(\underline{\mathcal{X}}), \quad (3.16a)$$

avec :

$$\delta \underline{F}(\underline{\mathcal{X}}) = \nabla_{\underline{x}} \delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}), \quad (3.16b)$$

où le champ de déplacement hétérogène $\delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$ est relié au champ de déplacement total $\underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$ par :

$$\underline{u}(\underline{\mathcal{X}}) = (\langle \underline{F} \rangle - \mathbb{I}) \cdot \underline{\mathcal{X}} + \delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}). \quad (3.17)$$

Le champ de déplacement $\underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$, ainsi que sa composante hétérogène $\delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$, n'intervient dans l'énergie élastique que par ses variations spatiales. Il est donc défini à un champ vectoriel uniforme près. Nous utilisons cette propriété pour imposer au champ $\delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$ d'être en moyenne nul :

$$\langle \delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle = \int_{\Omega} \delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}) dV = 0. \quad (3.18)$$

Finalement, l'état de déformation du matériau est totalement défini par le gradient de transformation moyen $\langle \underline{F}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle$ et le champ de déplacement hétérogène $\delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$, ce dernier vérifiant la contrainte donnée par l'équation (3.18).

Réciproquement, si, pour la rotation \underline{Q} qui apparaît dans l'équation (3.5), nous choisissons \underline{R}^{-1} , où \underline{R} est la rotation qui apparaît dans la décomposition polaire de \underline{F}^e :

$$(\underline{F}^e) = \underline{R} \cdot \underline{U}, \quad (3.7)$$

la relation (3.5) devient :

$$f_{el}^{int}(\underline{F}^e) = f_{el}^{int}(\underline{U}) \quad (3.8)$$

$$= f_{el}^{int} \left(\left(\underline{F}^{eT} \cdot \underline{F}^e \right)^{1/2} \right) \quad (3.9)$$

$$= f \left(\underline{F}^{eT} \cdot \underline{F}^e \right). \quad (3.10)$$

2. L'exposant "int" est relié au terme "interne", pour marquer une différence avec l'enthalpie élastique citée plus loin. Il n'est pas à relier au terme "interface", vu dans les chapitres précédents.

3.1.1 Équilibre mécanique

L'équilibre mécanique est atteint quand l'énergie élastique totale $\mathcal{F}_{el}^{int}(\{\underline{\varepsilon}^e\})$ est minimum. Lorsque le gradient de transformation moyen $\langle \underline{F}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle$ est imposé, cela conduit simplement aux équations suivantes :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{el}^{int}(\{\underline{\varepsilon}^e\})}{\delta(\delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}))} = 0. \quad (3.19)$$

Le champ $\delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$ n'intervient que par l'intermédiaire de ses variations spatiales. L'équation précédente devient donc :

$$\frac{\partial P_{ij}(\underline{\mathcal{X}})}{\partial X_j} = 0, \quad (3.20)$$

où nous avons introduit le 1^{er} tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff (ou tenseur de Boussinesq) :

$$P_{ij}(\underline{\mathcal{X}}) = \frac{\delta \mathcal{F}_{el}^{int}(\{\underline{\varepsilon}^e(\underline{\mathcal{X}})\})}{\delta(F_{ij}(\underline{\mathcal{X}}))}, \quad (3.21a)$$

$$\text{c.-à-d. :} \quad P_{ij}(\underline{\mathcal{X}}) = \frac{\partial f_{el}^{int}(\underline{\varepsilon}^e(\underline{\mathcal{X}}))}{\partial F_{ij}(\underline{\mathcal{X}})}. \quad (3.21b)$$

D'un point de vue thermodynamique, le 1^{er} tenseur de Piola-Kirchhoff est la grandeur conjuguée du gradient de transformation \underline{F} .

Il est également souhaitable de pouvoir laisser le système étudié choisir sa déformation moyenne en lui imposant une contrainte externe. En formulation lagrangienne, l'enthalpie (libre) élastique associée s'écrit sous la forme :

$$\mathcal{F}_{el} = \mathcal{F}_{el}^{int} - V \underline{P}^{app} : \langle \underline{F} \rangle, \quad (3.22)$$

où V est le volume du matériau dans sa configuration initiale, et \underline{P}^{app} un tenseur de contrainte appliqué. L'équilibre mécanique sera donc défini, comme ci-dessus, par l'équation (3.20) à laquelle s'ajoute la minimisation de l'enthalpie élastique par rapport aux éléments du tenseur moyen $\langle \underline{F} \rangle$:

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{el}}{\partial \langle \underline{F} \rangle_{ij}} = 0, \quad (3.23)$$

ce qui donne :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial f_{el}^{int}}{\partial \langle \underline{F} \rangle_{ij}} dV - V P_{ij}^{app} = 0. \quad (3.24)$$

En vertu de la définition même de $\langle \underline{F} \rangle$ (voir équation (3.16)), nous avons :

$$\frac{\partial f_{el}^{int}(\underline{\varepsilon}^e(\underline{\mathcal{X}}))}{\partial \langle \underline{F} \rangle_{ij}} = \frac{\partial f_{el}^{int}(\underline{\varepsilon}^e(\underline{\mathcal{X}}))}{\partial F_{ij}(\underline{\mathcal{X}})}. \quad (3.25)$$

Nous retrouvons ici le 1^{er} tenseur de Piola-Kirchhoff (voir équation (3.21b)). La minimisation de l'enthalpie élastique par rapport à $\langle \underline{F} \rangle$ aboutit donc à :

$$\langle P_{ij}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle = P_{ij}^{app}. \quad (3.26)$$

En d'autres termes, en contrainte appliquée et à l'équilibre mécanique, le 1^{er} tenseur de Piola-Kirchhoff doit avoir une divergence nulle (équation (3.20)) et une valeur moyenne égale à la contrainte appliquée

(équation (3.26)).

Avant de discuter d'algorithme de résolution des équations (3.20) et (3.26), nous souhaitons présenter dès maintenant un point méthodologique non fondamental mais utilisé dans l'implémentation numérique des algorithmes. Il s'agit de la manière utilisée pour calculer $\underline{P}(\underline{\mathcal{X}})$, 1^{er} tenseur de Piola-Kirchhoff.

Dans la mesure où l'énergie élastique ne dépend de l'état de déformation que par l'intermédiaire du tenseur élastique de Green-Lagrange $\underline{\varepsilon}^e$ (voir l'équation (3.12)), il est utile de faire apparaître le tenseur de contrainte conjugué à $\underline{\varepsilon}^e$, c'est-à-dire le 2nd tenseur élastique de Piola-Kirchhoff, que nous notons $\underline{\pi}^e$ ³ :

$$\pi_{ij}^e(\underline{\mathcal{X}}) = \frac{\delta \mathcal{F}_{el}^{int}}{\delta \varepsilon_{ij}^e(\underline{\mathcal{X}})}. \quad (3.27)$$

En utilisant les définitions données dans les équations (3.4), (3.11) et (3.13), nous pouvons montrer que le 1^{er} tenseur de Piola-Kirchhoff est relié au 2nd tenseur élastique $\underline{\pi}^e$ par :

$$\underline{P} = \underline{F}^e \cdot \underline{\pi}^e \cdot \underline{F}^{*T}. \quad (3.28)$$

Dans la situation présente, où la densité d'énergie élastique est quadratique en $\underline{\varepsilon}^e$ (voir équation (3.12)), le tenseur élastique $\underline{\pi}^e$ est donné simplement par :

$$\underline{\pi}^e = \underline{\lambda} : \underline{\varepsilon}^e. \quad (3.29)$$

Les équations (3.28) et (3.29) nous permettent de calculer le tenseur $\underline{P}(\underline{\mathcal{X}})$ à partir de la connaissance du tenseur de Green-Lagrange $\underline{\varepsilon}^e$. Ce dernier est relié au gradient de transformation moyen $\langle \underline{F} \rangle$ et au champ de déplacement hétérogène $\delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$ par les équations (3.4), (3.13) et (3.16), que, par souci de clarté, nous reproduisons ici :

$$\underline{\varepsilon}^e = \frac{1}{2} \left(\underline{F}^{eT} \cdot \underline{F}^e - \underline{\mathbb{I}} \right), \quad (3.30)$$

$$\underline{F}^e = \underline{F} \cdot \underline{F}^{*^{-1}}, \quad (3.31)$$

$$\underline{F} = \langle \underline{F} \rangle + \nabla_{\mathcal{X}} \delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}}). \quad (3.32)$$

Le paragraphe suivant est consacré à la présentation de l'algorithme de point fixe utilisé pour résoudre l'équilibre mécanique, c'est-à-dire pour identifier le champ $\delta \underline{u}(\underline{\mathcal{X}})$ solution de l'équation (3.20) et, si le système est contrôlé en contrainte, le tenseur moyen $\langle \underline{F} \rangle$ solution de l'équation (3.26).

3.2 Équilibre mécanique par méthode de point fixe

Nous résolvons l'équilibre mécanique associé aux équations (3.20) et (3.26) par une méthode de point fixe que nous présentons maintenant.

3. On différenciera le tenseur $\underline{\pi}^e$ du tenseur $\underline{\mathcal{S}}$, 2nd tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff, qui est le tenseur de contrainte conjugué au tenseur de Green-Lagrange $\underline{E} = \frac{1}{2} (\underline{F}^T \cdot \underline{F} - \underline{\mathbb{I}})$, où \underline{F} est le gradient de transformation total :

$$\underline{\mathcal{S}} = \frac{\delta \mathcal{F}_{el}^{int}}{\delta \underline{E}}.$$

En l'absence de déformation libre \underline{F}^* , $\underline{\mathcal{S}}$ s'identifie avec $\underline{\pi}^e$, le 2nd tenseur élastique de Piola-Kirchhoff.

Soit λ^0 un tenseur élastique de référence. Nous introduisons le tenseur de polarisation :

$$\underline{\tau}(\underline{\mathcal{X}}) = \underline{P}(\underline{\mathcal{X}}) - \lambda^0 : \underline{F}(\underline{\mathcal{X}}). \quad (3.33)$$

L'équation d'équilibre (3.20) devient alors :

$$\lambda_{ijkl}^0 \frac{\partial^2 \delta u_k(\underline{\mathcal{X}})}{\partial \mathcal{X}_j \partial \mathcal{X}_l} = - \frac{\partial \tau_{ij}(\underline{\mathcal{X}})}{\partial \mathcal{X}_j}, \quad (3.34)$$

où nous avons utilisé l'équation (3.16). Nous souhaitons résoudre cette équation dans l'espace de Fourier. En utilisant des conditions aux limites périodiques sur un volume de dimensions $(N_x d, N_y d, N_z d)$, où N_x, N_y , et N_z sont trois entiers fixes, nous introduisons les transformées de Fourier directe et inverse suivantes :

$$\widehat{f}(\underline{q}) = \frac{1}{V} \int f(\underline{\mathcal{X}}) e^{-i\underline{q} \cdot \underline{\mathcal{X}}}, \quad (3.35)$$

$$f(\underline{\mathcal{X}}) = \sum_{\underline{q}} \widehat{f}(\underline{q}) e^{i\underline{q} \cdot \underline{\mathcal{X}}}, \quad (3.36)$$

où le vecteur d'onde discret \underline{q} est défini de la manière suivante ⁴ :

$$\underline{q} = \frac{2\pi}{d} \left(\frac{h}{N_x}, \frac{k}{N_y}, \frac{l}{N_z} \right)_{\mathcal{B}'} \quad \text{avec } (h, k, l) \in \mathbb{N}^3 \quad (3.37)$$

L'application d'une dérivée partielle d'ordre 1 sur la fonction $f(\underline{\mathcal{X}})$ revient à appliquer l'opération suivante sur sa transformée de Fourier :

$$\widehat{\left(\frac{\partial f}{\partial \mathcal{X}_j} \right)}(\underline{q}) = i q_j \widehat{f}(\underline{q}). \quad (3.38)$$

L'expression de la transformée de Fourier (3.35) et la propriété (3.38) sont appliquées à l'équation (3.34). On obtient alors :

$$\lambda_{ijkl}^0 \widehat{\delta u}_k(\underline{q}) q_l q_j = i \widehat{\tau}_{ij}(\underline{q}) q_j. \quad (3.39)$$

On note $(\underline{G}^0)^{-1}(\underline{q})$ l'inverse du tenseur de Green, défini par :

$$(\underline{G}^0)^{-1}_{ij}(\underline{q}) = \lambda_{ikjl}^0 q_k q_l. \quad (3.40)$$

L'équation (3.39) peut alors s'écrire :

$$(\underline{G}^0)^{-1}_{ik} \widehat{\delta u}_k(\underline{q}) = i \widehat{\tau}_{ij}(\underline{q}) q_j. \quad (3.41)$$

$(\underline{G}^0)^{-1}(\underline{q})$ est inversible pour $\underline{q} \neq 0$, ce qui aboutit à :

$$\underline{q} \neq 0 : \quad \widehat{\delta u}_k(\underline{q}) = i G_{ki}^0(\underline{q}) \widehat{\tau}_{ij}(\underline{q}) q_j. \quad (3.42)$$

4. L'espace direct est ici continu. Le spectre des vecteurs d'onde \underline{q} , bien que discret en raison des conditions aux limites périodiques, est donc infini. Dans les applications numériques, la transformée de Fourier directe sera remplacée par une série de Fourier finie, ce qui correspond à une discrétisation de l'espace direct. Le spectre de \underline{q} sera alors borné.

Pour le mode $\underline{q} = 0$, nous utilisons la contrainte discutée plus haut et présentée dans l'équation (3.18), c'est-à-dire :

$$\underline{q} = 0 : \quad \widehat{\delta u}_k(\underline{q}) = 0. \quad (3.43)$$

On note que $\widehat{\delta u}(\underline{q})$ est fonction du tenseur $\widehat{\tau}(\underline{q})$. Or, ce tenseur est lui-même fonction de $\widehat{\delta u}(\underline{q})$. En effet, en se basant sur les équations (3.16) et (3.33), nous avons :

$$\underline{q} \neq 0 : \quad \widehat{\tau}_{ij}(\underline{q}) = \widehat{P}_{ij}(\underline{q}) - i \lambda_{ijrs}^0 \widehat{\delta u}_r(\underline{q}) q_s. \quad (3.44)$$

L'équation (3.42) peut être résolue à l'aide d'une méthode itérative de la façon suivante :

$$\widehat{\delta u}_k^{(n+1)}(\underline{q}) = i G_{ki}^0(\underline{q}) \left[\widehat{P}_{ij}^{(n)}(\underline{q}) - i \lambda_{ijrs}^0 \widehat{\delta u}_r^{(n)}(\underline{q}) q_s \right] q_j. \quad (3.45)$$

En utilisant l'équation (3.40), on obtient finalement :

$$\widehat{\delta u}_k^{(n+1)}(\underline{q}) = \widehat{\delta u}_k^{(n)}(\underline{q}) + i G_{ki}^0(\underline{q}) \widehat{P}_{ij}^{(n)}(\underline{q}) q_j. \quad (3.46)$$

Le tenseur $\delta \widetilde{F}(\underline{\mathcal{X}})$, partie hétérogène du gradient de transformation, peut être calculé à partir des composantes de Fourier $\widehat{\delta u}_i(\underline{q})$ et d'une transformée de Fourier inverse :

$$\delta F_{ij}(\underline{\mathcal{X}}) = \sum_{\underline{q}} \widehat{\delta F}_{ij}(\underline{q}) e^{i\underline{q} \cdot \underline{\mathcal{X}}}, \quad (3.47)$$

avec :

$$\widehat{\delta F}_{ij}(\underline{q}) = i \widehat{\delta u}_i(\underline{q}) q_j. \quad (3.48)$$

Le calcul du gradient de transformation total $\widetilde{F}(\underline{\mathcal{X}}) = \langle \widetilde{F} \rangle + \delta \widetilde{F}(\underline{\mathcal{X}})$ dépend de la manière dont on contrôle le système.

Si on impose un gradient de transformation moyen, nous avons simplement :

$$\langle \widetilde{F} \rangle = \widetilde{F}^{app}, \quad (3.49)$$

où le tenseur \widetilde{F}^{app} représente la déformation que l'on souhaite appliquer.

Si, par contre, nous souhaitons contrôler le système en lui imposant un tenseur de contrainte, il faut résoudre l'équation d'équilibre supplémentaire discutée plus haut (voir équation (3.26), que l'on représente de nouveau ci-dessous :

$$\langle \widetilde{F} \cdot \widetilde{F}^{*-1} \cdot \pi^e \cdot \widetilde{F}^{*-T} \rangle = P^{app}, \quad (3.50)$$

Nous avons utilisé l'équation (3.4), où est présentée la décomposition multiplicative du tenseur \widetilde{F} , et l'équation (3.28), où est montré le lien entre \widetilde{P} , le 1^{er} tenseur de Piola-Kirchhoff, et π^e , le 2nd tenseur de Piola-Kirchhoff.

On choisit de résoudre l'équation d'équilibre (3.50) à l'aide d'une méthode de point fixe que nous présentons maintenant. Nous utilisons tout d'abord la décomposition $\widetilde{F}(\underline{\mathcal{X}}) = \langle \widetilde{F} \rangle + \delta \widetilde{F}(\underline{\mathcal{X}})$ (voir équation (3.16)) pour ré-écrire l'équation (3.50) sous la forme :

$$\langle \widetilde{F} \rangle \cdot \langle \widetilde{F}^{*-1} \cdot \pi^e \cdot \widetilde{F}^{*-T} \rangle = P^{app} - \langle \delta \widetilde{F} \cdot \widetilde{F}^{*-1} \cdot \pi^e \cdot \widetilde{F}^{*-T} \rangle. \quad (3.51)$$

Nous pouvons isoler $\langle \underline{F} \rangle$, dans le membre de gauche de cette équation, si le tenseur $\langle \underline{F}^{\star-1} \cdot \underline{\pi}^e \cdot \underline{F}^{\star-T} \rangle$ est inversible. Ce n'est pas le cas si le système ne présente aucune déformation élastique (c.-à-d. si $\underline{\pi}^e(\underline{\mathcal{X}}) = 0$ en tout point $\underline{\mathcal{X}}$) et pose des problèmes numériques lorsque les déformations élastiques sont faibles ($\underline{\pi}^e(\underline{\mathcal{X}}) \sim 0$ pour la plupart des points $\underline{\mathcal{X}}$). Ces situations sont fréquentes puisque, en toute généralité, les microstructures (ici représentées par le tenseur de déformation libre \underline{F}^{\star}) évoluent de manière à minimiser l'énergie élastique résiduelle. Pour ces raisons, nous décidons d'écrire le 2nd tenseur élastique de Piola-Kirchhoff, $\underline{\pi}^e$, sous la forme :

$$\underline{\pi}^e = \underline{\Upsilon}_\alpha^e - \underline{\Gamma}_\alpha^e, \quad (3.52)$$

avec :

$$\underline{\Upsilon}_\alpha^e = \underline{\pi}^e + \frac{\alpha}{2} \underline{\lambda} : \underline{\mathbb{I}}, \quad (3.53)$$

$$\underline{\Gamma}_\alpha^e = \frac{\alpha}{2} \underline{\lambda} : \underline{\mathbb{I}}, \quad (3.54)$$

où α est un paramètre arbitraire positif. L'équation (3.51) peut alors s'écrire sous la forme :

$$\langle \underline{F} \rangle \cdot \langle \underline{\Upsilon}_\alpha \rangle = \underline{P}^{app} + \langle \underline{F} \rangle \cdot \langle \underline{\Gamma}_\alpha \rangle - \langle \delta \underline{F} \cdot (\underline{\Upsilon}_\alpha - \underline{\Gamma}_\alpha) \rangle, \quad (3.55)$$

ou encore :

$$\langle \underline{F} \rangle \cdot \langle \underline{\Upsilon}_\alpha \rangle = \underline{P}^{app} + \langle \underline{F} \cdot \underline{\Gamma}_\alpha \rangle - \langle \delta \underline{F} \cdot \underline{\Upsilon}_\alpha \rangle, \quad (3.56)$$

où les tenseurs $\underline{\Upsilon}_\alpha$ et $\underline{\Gamma}_\alpha$ sont reliés aux tenseurs $\underline{\Upsilon}_\alpha^e$ et $\underline{\Gamma}_\alpha^e$ précédemment définis par les expressions suivantes :

$$\underline{\Upsilon}_\alpha = \underline{F}^{\star-1} \cdot \underline{\Upsilon}_\alpha^e \cdot \underline{F}^{\star-T}, \quad (3.57)$$

$$\underline{\Gamma}_\alpha = \underline{F}^{\star-1} \cdot \underline{\Gamma}_\alpha^e \cdot \underline{F}^{\star-T}. \quad (3.58)$$

Il suffit alors de choisir un paramètre α suffisamment positif pour s'assurer que le tenseur $\underline{\Upsilon}_\alpha$ est inversible. Dans la suite, nous prendrons $\alpha = 0,5$. L'équation (3.56) devient alors :

$$\langle \underline{F} \rangle = \{ \underline{P}^{app} + \langle \underline{F} \cdot \underline{\Gamma}_\alpha \rangle - \langle \delta \underline{F} \cdot \underline{\Upsilon}_\alpha \rangle \} \cdot \langle \underline{\Upsilon}_\alpha \rangle^{-1}, \quad (3.59)$$

que l'on peut écrire sous la forme itérative suivante :

$$\langle \underline{F} \rangle^{(n+1)} = \{ \underline{P}^{app} + \langle \underline{F}^{(n)} \cdot \underline{\Gamma}_\alpha^{(n)} \rangle - \langle \delta \underline{F}^{(n)} \cdot \underline{\Upsilon}_\alpha^{(n)} \rangle \} \cdot \langle \underline{\Upsilon}_\alpha^{(n)} \rangle^{-1}. \quad (3.60)$$

Nous avons donc obtenu une équation de point fixe sur le tenseur moyen $\langle \underline{F} \rangle$, que nous résolvons simultanément avec l'équation de point fixe (3.46) sur $\widehat{\delta u}_k(\underline{q})$, transformée de Fourier des déplacements hétérogènes. La résolution du problème en contrainte appliquée à l'aide d'un point fixe se distingue de ce que l'on peut trouver dans la littérature (par ex. Eisenlohr *et al.* [2013]) de par sa facilité d'implémentation et son efficacité lorsque associée à l'équation (3.46) pour résoudre l'équilibre mécanique.

3.2.1 Choix du critère d'arrêt de l'algorithme itératif

Les équations (3.46) et (3.60) sont résolues de manière itérative. Pour cela, il est nécessaire de spécifier un critère d'arrêt. Quand ce critère sera atteint, la méthode de point fixe sera dite convergée. Eisenlohr *et al.* [2013] et Moulinec et Suquet [1998] considèrent que la convergence est atteinte lorsque la divergence du champ $\tilde{P}(\underline{X})$ atteint une valeur suffisamment faible. Cette condition revient à s'assurer que l'équation (3.20) est bien respectée. Dans le cas du critère d'arrêt de Eisenlohr *et al.* [2013], cette condition est testée à chaque itération, et est écrite, dans l'espace de Fourier sous la forme :

$$\frac{\sqrt{\sum_{\underline{q}} |i\underline{q} \cdot \widehat{\tilde{P}}(\underline{q})|^2 / N^2}}{\|\widehat{\tilde{P}}(\underline{q} = 0)\|_2} \leq \epsilon_{eq}, \quad (3.61)$$

avec N le nombre de nœuds dans la simulation et ϵ_{eq} une tolérance. La norme $\|\underline{\square}\|_2$ représente ici la norme spectrale d'un tenseur d'ordre 2, c.-à-d. :

$$\|\underline{\square}\|_2 = \sqrt{\zeta_{max}(\underline{\square}^* \cdot \underline{\square})} \quad \text{avec} \quad \underline{\square}^* = \overline{\underline{\square}^T}, \quad (3.62)$$

et $\zeta_{max}(\underline{\square})$ étant la valeur propre maximale du tenseur $\underline{\square}$.

On note qu'il n'est pas possible d'utiliser ce critère dans le cas où l'on considère une situation où les contraintes imposées sont nulles (c. - - d. $\langle \tilde{P} \rangle = \widehat{\tilde{P}}(\underline{q} = 0) = 0$).

Kabel *et al.* [2014] propose d'utiliser un critère basé sur le tenseur gradient de transformation \underline{F} . Il est à noter que l'algorithme proposé par Kabel *et al.* [2014] est un algorithme de point fixe sur \underline{F} . Ce critère a la forme suivante :

$$\frac{|\|\underline{F}^{(n+1)}\|_2 - \|\underline{F}^{(n)}\|_2|^2}{\|\underline{F}^{(1)}\|_2} \leq \epsilon_{eq}. \quad (3.63)$$

Ce critère se base sur le calcul de la différence des champs de normes des tenseurs gradient de transformation et non sur l'écart qui peut exister entre chaque composantes de ces tenseurs.

Dans le cas de l'algorithme présenté dans cette étude, on a une évaluation de $\widehat{\delta u}(\underline{q})$ à chaque itération (équation (3.46)). On choisit de considérer le critère d'arrêt suivant :

$$\sum_k \max_{\underline{q}} \left| \widehat{\delta u}_k^{(n+1)}(\underline{q}) - \widehat{\delta u}_k^{(n)}(\underline{q}) \right| \leq \epsilon_{eq}. \quad (3.64)$$

On note que ce critère se base sur le maximum de l'écart entre chaque composante du vecteur $\widehat{\delta u}(\underline{q})$ à chaque itération. Il nous permet d'éviter de calculer des normes matricielles à chaque itération.

Dans le cas des contraintes imposées, il est nécessaire de considérer un critère d'arrêt supplémentaire pour l'équation (3.60). Pour une contrainte \tilde{P}^{app} donnée, on l'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\|\langle \tilde{P}(\underline{X}) \rangle - \tilde{P}^{app}\|_F}{\|\tilde{P}^{app}\|_F} \leq \epsilon_{cl}, \quad (3.65)$$

où ϵ_{cl} est la tolérance sur la résolution de l'équation associée aux conditions aux limites, et $\|\underline{\square}\|_F$ la norme de Frobenius d'un tenseur d'ordre 2, c.-à-d. :

$$\|\underline{\square}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 |\square_{ij}|^2}. \quad (3.66)$$

Si on est dans le cas de contraintes imposées nulles, on considère au dénominateur le tenseur \underline{P}^{ref} défini par :

$$P_{ij}^{ref} = \sqrt{\sum_{\underline{X}} |P_{ij}(\underline{X})|^2}. \quad (3.67)$$

On choisit $\epsilon_{cl} = 10^{-4}$ pour le reste de cette étude (ce qui correspond à une tolérance au dixième de MPa si l'on choisit de considérer des contraintes appliquées en GPa).

Une fois la convergence atteinte (équation (3.64) vérifiée), une vérification de la qualité de l'équilibre mécanique obtenu est réalisée à l'aide du calcul d'une norme de type L_2 et L_∞ de la divergence des contraintes. En notant $\underline{b}(\underline{q}) = i\underline{q} \cdot \widehat{\underline{P}}(\underline{q})$, ces deux normes sont calculées dans l'espace de Fourier de la manière suivante :

$$\|\text{div}(\underline{P})\|_{L_2} = \sqrt{\sum_{\underline{q}} \sum_i |b_i(\underline{q})|^2}, \quad (3.68a)$$

$$\|\text{div}(\underline{P})\|_{L_\infty} = \sqrt{\sum_i \left[\sum_{\underline{q}} |b_i(\underline{q})| \right]^2}. \quad (3.68b)$$

Il est facile de se convaincre que l'inégalité suivante est vérifiée :

$$\|\text{div}(\underline{P})\|_{L_2} \leq \|\text{div}(\underline{P})\|_{L_\infty}. \quad (3.69)$$

Les calculs de ces normes appliquées à la divergence du tenseur des contraintes \underline{P} est ensuite rapporté à la moyenne du champ de tenseur des contraintes \underline{P} . Dans le cas de contraintes appliquées nulles, on considèrera plutôt le tenseur de contraintes \underline{P}^{ref} (voir équation (3.67)). On remarque que les quantités ainsi obtenues sont homogènes à des m^{-1} . Cette longueur caractéristique est relative à la discrétisation de notre grille numérique. L'implémentation de l'opérateur de la divergence est adimensionné, ce qui nous permet d'obtenir des quantités adimensionnées pour évaluer la qualité de l'équilibre mécanique.

3.2.2 Choix du milieu de référence homogène

Les valeurs choisies pour les constantes élastiques λ_{ijkl}^0 du milieu de référence affectent la convergence et la vitesse de convergence de l'algorithme de point fixe. En effet, plus les valeurs considérées sont importantes, plus le solveur est stable du point de vue de la convergence, et plus le nombre d'itérations pour atteindre la convergence est important. Il est alors nécessaire de déterminer des valeurs permettant la convergence tout en gardant un nombre d'itérations acceptable. Dans la littérature, Eisenlohr *et al.* [2013] fait le choix suivant :

$$\lambda_{\approx}^0 = \langle \lambda_{\approx}(\underline{X}) \rangle. \quad (3.70)$$

Kabel et al. [2014] montre que ce choix peut entraîner la divergence du schéma numérique dans le cas d'un système fortement hétérogène (forte différence de constantes élastiques dans le milieu considéré). Aussi, dans le cas d'un système biphasé isotrope, *Kabel et al. [2014]* rappelle que la prise en compte de la moyenne arithmétique des constantes élastiques des deux phases est plus optimale que la moyenne volumique de l'ensemble du système. *Kabel et al. [2014]* propose alors une autre expression de $\underline{\underline{\lambda}}^0$:

$$\underline{\underline{\lambda}}^0 = k \underline{\underline{\mathbb{I}}} \quad \text{avec} \quad k = \frac{\zeta_{max}(\underline{\underline{\lambda}}(\underline{\underline{X}})) + \zeta_{min}(\underline{\underline{\lambda}}(\underline{\underline{X}}))}{2}, \quad (3.71)$$

où $\zeta_{max}(\underline{\underline{\square}})$ et $\zeta_{min}(\underline{\underline{\square}})$ sont respectivement la valeur propre maximale et minimale du tenseur $\underline{\underline{\square}}$.

Dans le cas d'une microstructure qui évolue dans le temps, présentant des précipités plus ou moins durs, ces expressions de $\underline{\underline{\lambda}}^0$ sont évaluées à chaque pas d'évolution de la microstructure. On préférera choisir un tenseur $\underline{\underline{\lambda}}^0$ à valeurs constantes au cours de l'évolution de la microstructure, pour éviter de le recalculer, ainsi que la fonction de Green associée (voir [équation \(3.40\)](#)), à chaque pas de temps. Aussi, on souhaite éviter que le calcul diverge. Pour cela, on accepte que le nombre d'itérations soit relativement important au cours du premier calcul de l'équilibre (de l'état initial non déformé à l'état déformé). Ce choix n'est toutefois pas très coûteux dans le cas de l'étude d'une microstructure en évolution, pour laquelle l'équilibre mécanique doit être réalisé à chaque pas d'intégration temporel. En effet, après le premier pas, le point fixe utilisé pour résoudre l'équilibre mécanique peut être initialisé avec les champs obtenus au pas précédent, qui est une très bonne estimation de l'équilibre puisque la microstructure évolue peu en un pas de temps. Dans nos simulations, si la convergence du point fixe sur la configuration initiale peut nécessiter plus de 60 itérations, les convergences ultérieures sont généralement réalisées en moins de 7 itérations.

En se basant sur ces éléments, on choisit $\underline{\underline{\lambda}}^0$ suffisamment grand pour assurer la convergence. Une solution est d'exprimer $\underline{\underline{\lambda}}^0$ en fonction des tenseurs $\underline{\underline{\lambda}}^i$ correspondant aux tenseurs des constantes élastiques de chacune des phases i en présence dans le système de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\lambda}}_a^0 = \frac{k_\lambda}{n_{phases}} \sum_{i=1}^{n_{phases}} \underline{\underline{\lambda}}^i, \quad \text{avec} \quad k_\lambda \in \mathbb{R}_+^*. \quad (3.72)$$

La valeur du paramètre positif k_λ affecte la stabilité du solveur et sa vitesse de convergence (voir [section tableau 3.3.1.2](#)).

Une autre façon d'exprimer le tenseur $\underline{\underline{\lambda}}^0$ est considérée. Elle se base sur le fait que l'on ne considère pas ce tenseur comme un tenseur de constantes élastiques mais comme un paramètre numérique influant sur la convergence de notre algorithme. On l'écrit de la façon suivante :

$$\underline{\underline{\lambda}}_b^0 = z_\lambda \underline{\underline{\mathbb{I}}} \quad \text{avec} \quad \mathbb{I}_{ijkl} = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \quad (3.73)$$

et $z_\lambda \in \mathbb{R}_+^*$.

Le choix des valeurs de k_λ et z_λ ainsi que le choix du tenseur $\underline{\underline{\lambda}}^0$ à considérer dans notre algorithme est discuté dans la [Section 3.3.1.2](#).

3.2.3 Résumé de l'algorithme de résolution de l'équilibre mécanique par méthode spectrale

<u>* Préparation :</u>	→ Calcul de $\underline{\lambda}^0$	(équation (3.72) ou (3.73))
	→ Calcul de \underline{G}^0	(équation (3.40))
<u>* Initialisation :</u>	→ $\widehat{\delta u}^{(0)}(\underline{q}) = \begin{cases} 0 & \text{si } t = 0 \\ \widehat{\delta u}(t) & \text{si } t > 0 \end{cases}$	
	* Déformations appliquées	
	→ $\underline{F}^{(0)} = \underline{F}^{app}$	
	* Contraintes appliquées	
	→ $\underline{F}^{(0)} = \begin{cases} \underline{\mathbb{I}} & \text{si } t = 0 \\ \underline{F}(t) & \text{si } t > 0 \end{cases}$	
	→ $\langle \underline{F} \rangle^{(0)} = \langle \underline{F}^{(0)} \rangle$	
	→ Calcul de $\underline{\varepsilon}^{e(0)}, \underline{\pi}^{e(0)}, \underline{P}^{(0)}$	(équation (3.28))
<u>* Boucle :</u>	→ Calcul de $\mathcal{TF} \left\{ \underline{P}^{(n)} \right\} = \widehat{\underline{P}}^{(n)}$	
	→ Calcul de $\widehat{\delta u}_k^{(n+1)}$	(équation (3.46))
	→ Calcul de $\widehat{\delta \underline{F}}^{(n+1)}$	(équation (3.48))
	→ Calcul de $\mathcal{TF}^{-1} \left\{ \widehat{\delta \underline{F}}^{(n+1)} \right\} = \delta \underline{F}^{(n+1)}$	
	* Déformations appliquées	
	→ $\underline{F}^{(n+1)} = \underline{F}^{app} + \delta \underline{F}^{(n+1)}$	(équation (3.16))
	* Contraintes appliquées	
	→ Calcul de $\underline{\Upsilon}_\alpha^{(n+1)}$ et $\langle \underline{F} \rangle^{(n+1)}$	(équation (3.57) et (3.60))
	→ $\underline{F}^{(n+1)} = \langle \underline{F} \rangle^{(n+1)} + \delta \underline{F}^{(n+1)}$	(équation (3.16))
	→ Calcul de $\underline{\varepsilon}^{e(n+1)}, \underline{\pi}^{e(n+1)}, \underline{P}^{(n+1)}$	(équation (3.28))
	→ Vérification du critère d'arrêt	(équation (3.64) et (3.65))
<u>* Post-boucle :</u>	→ Vérification de la qualité de l'équilibre mécanique	(équation (3.68b))

TABLEAU 3.1 – Résumé des différentes étapes du solveur mécanique par méthode spectrale développé. Les différentes équations associées à chaque étape sont spécifiées.

3.3 Validation de la résolution de l'équilibre mécanique

Dans cette partie, on se propose de vérifier que l'algorithme itératif proposé permet d'atteindre l'équilibre mécanique dans deux situations particulières : un laminé de St-Venant-Kirchhoff, système biphasé avec des interfaces planes séparant les phases, et une configuration de type Eshelby, avec un système isotrope composé d'une inclusion sphérique dans un milieu fini. Dans les deux cas, des comparaisons de champs mécaniques avec des solutions analytiques sont exposées pour tester la validité du solveur proposé.

3.3.1 Laminé de St-Venant-Kirchhoff

Le cas-test du laminé de St-Venant-Kirchhoff (inspiré de [Kabel et al. \[2014\]](#)) se base sur une configuration "laminé" de deux matériaux élastiques ([figure 3.1](#)). On considère que le comportement élastique du laminé est du type Saint-Venant-Kirchhoff (hyperélastique), c'est-à-dire qu'il existe une relation linéaire entre le second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff $\underline{\underline{S}}$ et le tenseur des déformations élastiques de Green-Lagrange $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$:

$$S_{ij} = \lambda_{ijkl} \varepsilon_{kl}^e. \quad (3.74)$$

Un chargement extérieur de type déformation moyenne est appliqué (c.-à-d. $\langle \underline{\underline{F}} \rangle = \underline{\underline{F}}^{app}$ est imposé). Dans le cas où l'on considère l'hypothèse selon laquelle les deux phases du laminé se déforment de manière homogène, la résolution de l'équilibre mécanique admet une solution analytique.

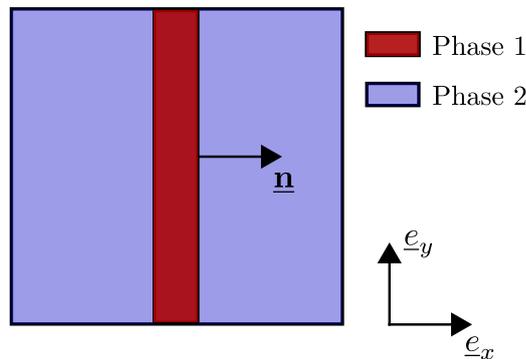


FIGURE 3.1 – Représentation schématique du laminé biphasé étudié.

3.3.1.1 Calcul d'une solution de référence

Dans les équations qui suivent, la fraction volumique de la phase 1 est notée $f_v^{(1)}$ et les exposants (1) et (2) sont associés aux entités relatives respectivement à la phase 1 et 2 ([figure 3.1](#)). À l'équilibre, la continuité des composantes normales de la contrainte le long des interfaces conduit à :

$$\underline{\underline{P}}^{(1)} \cdot \underline{n} = \underline{\underline{P}}^{(2)} \cdot \underline{n}. \quad (3.75)$$

Il est également nécessaire de vérifier les équations de compatibilité cinématique à l'interface. Ces équations impliquent que le saut de gradient de transformation $\underline{\underline{F}}$ à l'interface puisse s'écrire sous la forme

d'un tenseur de rang 1 de la manière suivante :

$$\llbracket \tilde{F} \rrbracket = \tilde{F}^{(2)} - \tilde{F}^{(1)} = \underline{a} \otimes \underline{n}. \quad (3.76)$$

Cette condition est nécessaire et suffisante pour que l'interface soit un plan invariant. Les composantes des tenseurs $\tilde{F}^{(1)}$ et $\tilde{F}^{(2)}$, ainsi que celles du vecteur \underline{a} , sont les inconnues du problème.

Enfin, la condition limite en déformation moyenne appliquée nous donne l'équation suivante :

$$\langle \tilde{F} \rangle = f_v^{(1)} \tilde{F}^{(1)} + (1 - f_v^{(1)}) \tilde{F}^{(2)}. \quad (3.77)$$

La combinaison des équations (3.76) et (3.77) nous permet de simplifier le problème en passant de 21 inconnues à 3 inconnues (composantes du vecteur \underline{a} seulement). En effet, on a :

$$\begin{cases} \tilde{F}^{(1)} = \langle \tilde{F} \rangle - (1 - f_v^{(1)}) \underline{a} \otimes \underline{n}, \\ \tilde{F}^{(2)} = \langle \tilde{F} \rangle + f_v^{(1)} \underline{a} \otimes \underline{n}. \end{cases} \quad (3.78)$$

Résoudre l'équilibre mécanique revient finalement à résoudre une équation cubique sur le vecteur \underline{a} qui s'écrit :

$$\underline{g}(\underline{a}) = \tilde{P}^{(1)}(\underline{a}) \cdot \underline{n} - \tilde{P}^{(2)}(\underline{a}) \cdot \underline{n} = 0, \quad (3.79)$$

avec $\tilde{P}^{(i)}(\underline{a})$ exprimé de la même façon que dans l'équation (3.28) pour $i = 1, 2$ (sans déformation libre).

On choisit de résoudre l'équation (3.79) en utilisant une méthode de Newton-Raphson. Le vecteur \underline{a} est alors obtenu à l'aide de la relation itérative suivante :

$$\underline{a}^{(n+1)} = \underline{a}^{(n)} - \underline{g}(\underline{a}^{(n)}) \cdot \left[\frac{d\underline{g}(\underline{a}^{(n)})}{d\underline{a}^{(n)}} \right]^{-1}. \quad (3.80)$$

Une fois le vecteur \underline{a} solution déterminé, les tenseurs gradient de transformation $\tilde{F}^{(1)}$ et $\tilde{F}^{(2)}$ sont obtenus à partir de l'équation (3.78). On utilise cet algorithme pour le calcul d'une solution de référence dont les données d'entrées sont présentées dans le [tableau 3.2](#).

Phase	f_v	λ (GPa)	μ (GPa)	E (GPa)	ν (GPa)
1	0,10	50	25	66,66	0,33
2	0,90	1000	25	74,39	0,48

TABLEAU 3.2 – Paramètres matériaux des deux phases considérées dans le cas du laminé de Saint-Venant.

Le même cas fortement hétérogène est étudié par [Kabel et al. \[2014\]](#). Ce calcul permet de nous assurer de l'obtention d'une solution de référence comparable. Quatre cas de chargement en déformation $\langle \tilde{F} \rangle$ sont étudiés pour valider le solveur mécanique présenté dans la [Section 3.2](#).

La [figure 3.2](#) montre les tracés des composantes des tenseurs gradient de déformation $F^{(1)}$ et $F^{(2)}$ obtenues pour différentes amplitudes de chargement extérieur $\langle \tilde{F} \rangle_{xx}$ (Cas 1), $\langle \tilde{F} \rangle_{yy}$ (Cas 2), $\langle \tilde{F} \rangle_{xy}$ (Cas 3) et $\langle \tilde{F} \rangle_{yx}$ (Cas 4). Le calcul de la solution de référence est réalisé sur une plage allant de -9% (compression) à +50% (traction) d'amplitude pour les cas (1) et (2), et de 0 à 50% d'amplitude pour les cas (3)

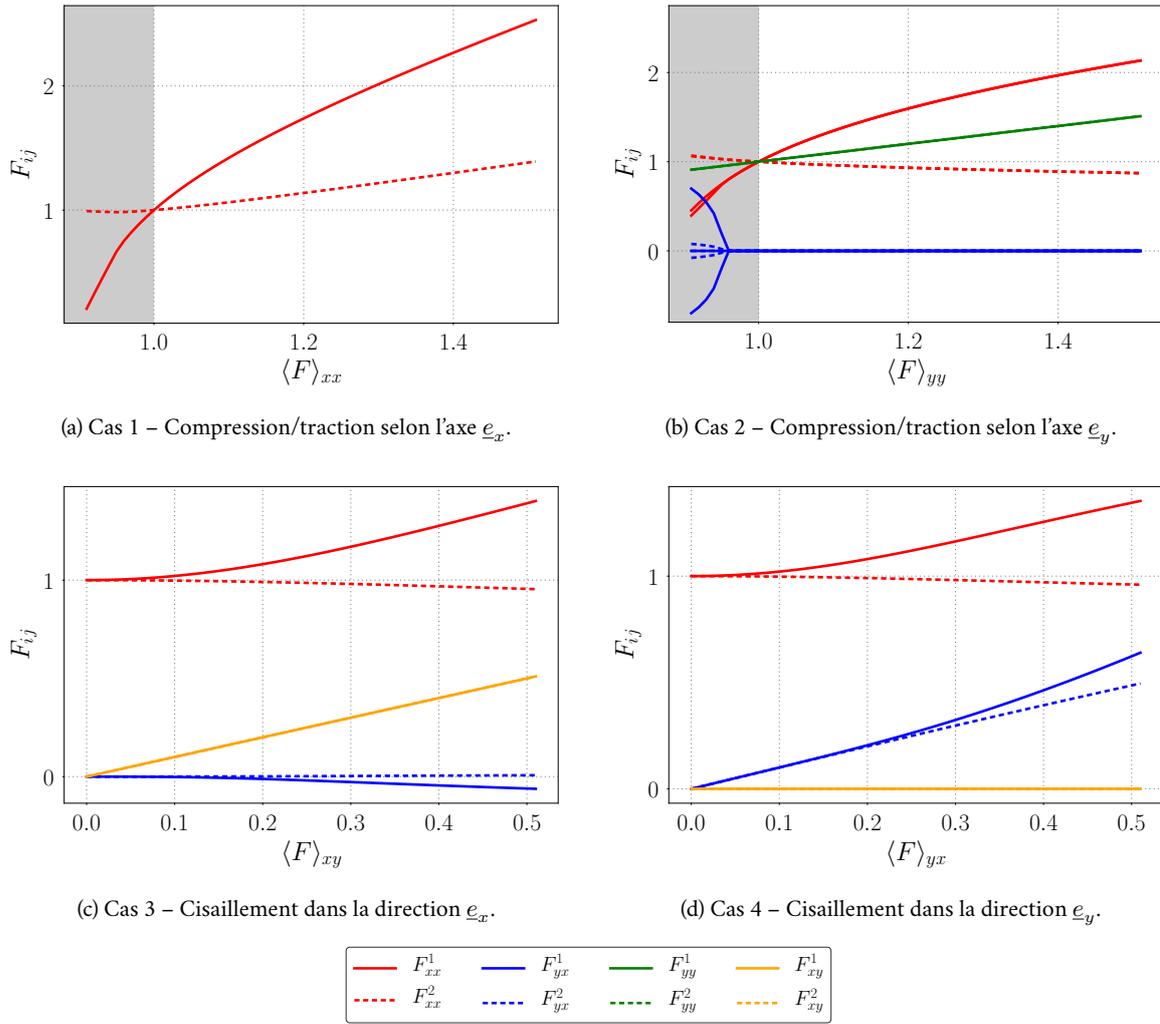
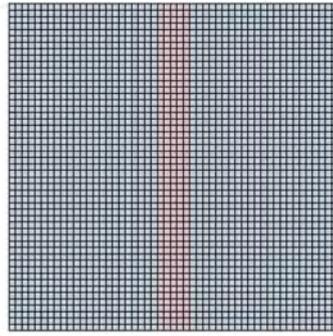


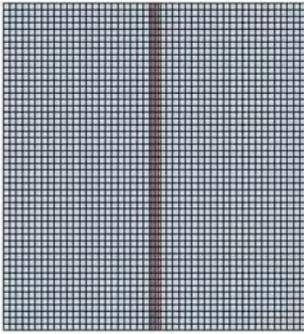
FIGURE 3.2 – Représentation graphique de la solution de référence pour l'évolution d'une partie des composantes $F_{ij}^{(i)}$ dans chacune des phases (i), pour des types et amplitudes de chargement différents (cas sans prise en compte de déformation libre).

et (4). Les cas de chargement (1) et (2) correspondent à des cas de compression ou traction en $\langle \tilde{F} \rangle$ selon les axes \underline{e}_x et \underline{e}_y de la figure 3.1. Les zones grisées sur les figures 3.2a et 3.2b correspondent aux domaines de compressions respectifs des deux cas de chargement (1) et (2). On note qu'un comportement instable est attendu dans le cas de chargement (2) en compression (figure 3.2b). Le comportement du laminé soumis à une compression le long de \underline{e}_y se comporte de 2 façons différentes :

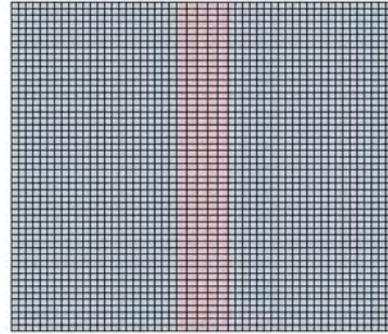
- Les deux phases du laminé sont comprimées sans apparition de déformation de cisaillement dans chacune des phases ($F_{xy}^{(1)} = F_{xy}^{(2)} = 0$ et $F_{yx}^{(1)} = F_{yx}^{(2)} = 0$).
- À partir d'une certaine amplitude de compression $\langle \tilde{F} \rangle_{yy}$, une déformation de cisaillement importante apparaît dans l'une des deux phases et provoque la mise en "zigzag" du laminé (voir figure 3.3b). On observe alors une augmentation/diminution des composantes $F_{yx}^{(i)}$ et $F_{xy}^{(i)}$ dans chacune des phases du laminé, avec une amplitude plus élevée dans la phase (1) la plus molle.



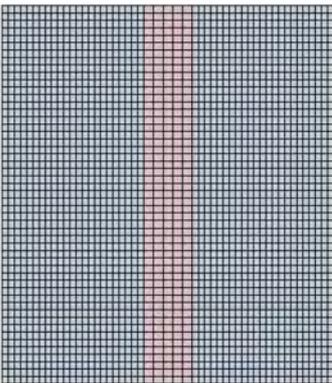
(a) Laminé non déformé.



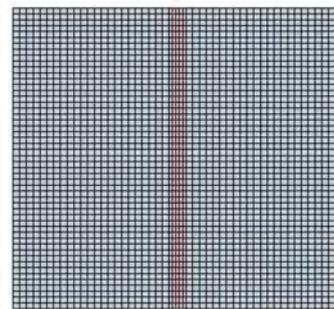
(b) Cas 1a – Compression selon l'axe \underline{e}_x .



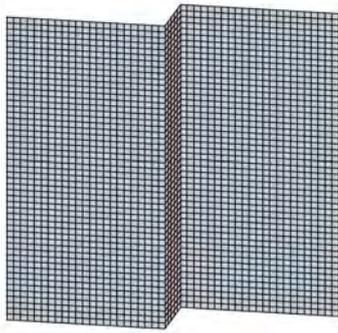
(c) Cas 1b – Traction selon l'axe \underline{e}_x .



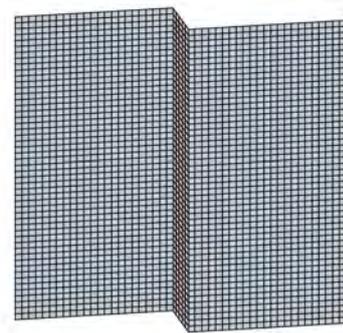
(d) Cas 2a – Traction selon l'axe \underline{e}_y .



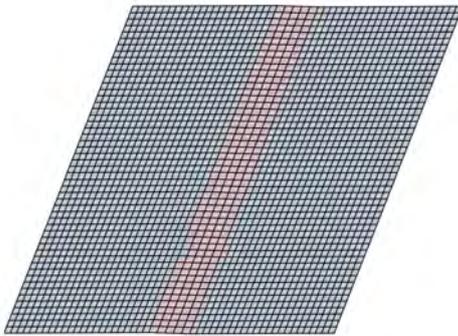
(e) Cas 2b – Compression selon l'axe \underline{e}_y .



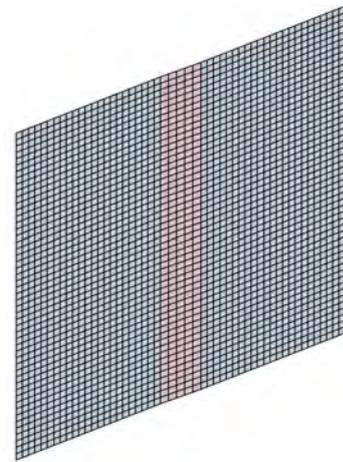
(f) Cas 2c – Compression selon l'axe \underline{e}_y .



(g) Cas 2d – Compression selon l'axe \underline{e}_y .



(h) Cas 3 – Cisaillement dans la direction \underline{e}_x .



(i) Cas 4 – Cisaillement dans la direction \underline{e}_y .

FIGURE 3.3 – Représentation du maillage déformé pour les différents cas de déformation appliquée au laminé. Se référer au [tableau 3.4](#) pour une description plus détaillée des cas de chargement. Seuls 1/4 des nœuds sont représentés par souci de lisibilité.

3.3.1.2 Résultats obtenus par le solveur mécanique par méthode spectrale

Calibration de k_λ et z_λ

Dans le but d'éviter que le calcul itératif diverge, il est nécessaire de choisir des valeurs de k_λ et z_λ suffisamment grandes pour la construction des tenseurs λ_a^0 et λ_b^0 (voir [Section 3.2.2](#)). Des valeurs élevées de ces constantes tendent à stabiliser l'algorithme tout en augmentant le nombre d'itérations nécessaires à l'atteinte du critère d'arrêt. On suppose que les plages de déformation étudiées associées à la forte inhomogénéité des constantes élastiques dans le laminé sont suffisamment importantes pour

nous permettre de calibrer les valeurs k_λ et z_λ permettant de construire les tenseurs $\lambda_{\approx a}^0$ et $\lambda_{\approx b}^0$.

Les 4 cas de chargement présentés dans la Section 3.3.1.1 sont calculés numériquement avec des valeurs de k_λ et z_λ croissantes. Les valeurs de k_λ et z_λ ayant permis de résoudre l'équilibre mécanique dans l'ensemble des cas, sans divergence des deux algorithmes respectifs (l'algorithme A est considéré avec $\lambda_{\approx a}^0$, l'algorithme B avec $\lambda_{\approx b}^0$), sont données dans le tableau 3.3. Il s'agit alors des valeurs les plus petites de ces constantes permettant que la convergence soit atteinte dans l'ensemble des cas. Les valeurs des coefficients de Lamé λ et μ associés aux tenseurs $\lambda_{\approx a}^0$ et $\lambda_{\approx b}^0$ construits y sont également spécifiés.

Algorithme A : $\lambda_{\approx a}^0 = \lambda_{\approx a}^0$			Algorithme B : $\lambda_{\approx b}^0 = \lambda_{\approx b}^0$		
k_λ	λ (GPa)	μ (GPa)	z_λ	λ (GPa)	μ (GPa)
8	4200	200	540	0	540

TABLEAU 3.3 – Paramètres numériques relatifs aux milieux de référence homogènes.

On note alors le caractère numérique des composantes des tenseurs $\lambda_{\approx a}^0$ et $\lambda_{\approx b}^0$ qui n'ont pas de réel sens physique. En effet, ces deux tenseurs d'ordre 4 ne doivent pas être considérés comme des tenseurs d'élasticité de milieux de référence, mais comme des paramètres numériques suffisamment élevés pour permettre la convergence de l'algorithme choisi (A ou B).

Les résultats de la figure 3.4 sont obtenus avec les algorithmes A et B pour une tolérance ϵ_{eq} prise égale à 10^{-4} (voir équation (3.64)). Le tableau 3.4 recense la numérotation des cas de chargement étudiés lors du calcul de la solution de référence (figure 3.2). Cette numérotation sera utilisée dans le reste de cette partie. On note que pour les cas de chargement 2c et 2d, un cisaillement $\langle F \rangle_{yx}$ d'amplitude $\pm 1\%$ est ajouté à la condition aux limites pour provoquer l'apparition des branches d'instabilité observées dans la section précédente. On note le bon accord des tracés des composantes de \tilde{F} dans chacune des phases, et l'obtention, comme attendu, de champs mécaniques homogènes par phase.

Contrairement à un algorithme itératif écrit sur le gradient de transformation \tilde{F} , l'algorithme itératif développé est ici écrit sur le vecteur déplacement \underline{u} . Il permet de visualiser la position des noeuds de la grille déformée sans opération d'intégration supplémentaire. Le maillage déformé est alors représenté sur la figure 3.3 dans le but d'imager les courbes obtenues sur la figure 3.4.

Comparaison des solutions numériques à la solution de référence : algorithmes A et B

Dans cette partie, on compare plus précisément les résultats numériques obtenus par les algorithmes A et B. Cette comparaison est réalisée pour une tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-3} , 10^{-4} et 10^{-5} . On comparera les valeurs de l'erreur relative à la solution de référence, les valeurs de la qualité de l'équilibre mécanique (équation (3.68)) en fin de calcul et le nombre d'itérations maximal nécessaire à l'atteinte de l'équilibre mécanique. Ces différents résultats nous permettront de choisir le tenseur λ_{\approx}^0 ainsi que la valeur de ϵ_{eq} à considérer lors de l'utilisation du solveur mécanique.

La figure 3.5 montre une erreur relative élevée obtenue pour une tolérance $\epsilon_{eq} = 10^{-3}$, quelque soit l'algorithme utilisé. Les valeurs d'erreurs de l'ordre de 150% obtenues dans les cas 2c et 2d correspondent au non-déclenchement de l'instabilité à une amplitude de chargement donnée. En effet, pour

Cas n°	Description	Cas n°	Description
1a	Traction selon e_x $\langle \tilde{F} \rangle_{xx} > 0$	2c	Compression selon e_y $\langle \tilde{F} \rangle_{yy} < 0$ $\langle \tilde{F} \rangle_{yx} = 0,01$
1b	Compression selon e_x $\langle \tilde{F} \rangle_{xx} < 0$	2d	Compression selon e_y $\langle \tilde{F} \rangle_{yy} < 0$ $\langle \tilde{F} \rangle_{yx} = -0,01$
2a	Traction selon e_y $\langle \tilde{F} \rangle_{yy} > 0$	3	Cisaillement selon e_x $\langle \tilde{F} \rangle_{xy} > 0$
2b	Compression selon e_y $\langle \tilde{F} \rangle_{yy} < 0$ $\langle \tilde{F} \rangle_{yx} = 0$	4	Cisaillement selon e_y $\langle \tilde{F} \rangle_{yx} > 0$

TABLEAU 3.4 – Description des huit cas de chargements étudiés.

cette valeur de tolérance, l'instabilité observée dans les cas 2c et 2d survient pour des chargements plus élevés que dans le cas des tolérances valant 10^{-4} ou 10^{-5} . Dès lors, on évitera d'utiliser une tolérance supérieure à $\epsilon_{eq} = 10^{-4}$ lorsque le solveur est utilisé. Le reste de la comparaison est faite pour des valeurs de tolérances valant 10^{-4} ou 10^{-5} .

De manière générale, on observe sur la [figure 3.6](#) que la solution numérique obtenue est en accord avec la solution de référence calculée précédemment. Le maximum d'erreur de 9,88% est obtenu avec une tolérance $\epsilon_{eq} = 10^{-4}$ en utilisant l'algorithme B, dans le cas de chargement 3. Cette erreur peut être justifiée par le fait que la valeur de la solution de référence en ce point tend vers zéro, ce qui provoque une augmentation de l'erreur relative. On peut également voir sur cette figure que les valeurs d'erreur relative ne sont pas fortement impactées par la diminution de la tolérance ϵ_{eq} de 10^{-4} à 10^{-5} (hors Cas 3).

Les figures [3.7](#) et [3.8](#) représentent respectivement les valeurs des normes L_2 et L_∞ de la divergence des contraintes obtenues pour les différents cas de chargement, pour les deux valeurs de tolérance étudiées et dans le cas de l'utilisation des deux algorithmes. Les résultats qui y sont présentés sont cohérents avec l'inégalité (3.69). En effet, on note un facteur 10 entre les valeurs de $\|\text{div}(\tilde{P})\|_{L_\infty}$ et $\|\text{div}(\tilde{P})\|_{L_2}$ obtenues. Les valeurs maximales des normes de $\text{div}(\tilde{P})$ sont de l'ordre de 8×10^{-4} et $8,5 \times 10^{-3}$ respectivement pour les normes L_2 et L_∞ . Au vu des valeurs maximales obtenues pour ces deux normes, on peut dire que l'équilibre mécanique est atteint avec les deux algorithmes pour les deux valeurs de tolérance étudiées. On note cependant que l'algorithme B permet d'atteindre une meilleure qualité d'équilibre mécanique que l'algorithme A dans tous les cas de chargements.

Sur la [figure 3.9](#), on peut voir le nombre maximal d'itérations nécessaire à l'atteinte du critère d'arrêt (exprimé sur ϵ_{eq}) pour les différents cas de chargement et pour les deux valeurs de tolérances ϵ_{eq} étudiées. Hors cas où l'on se trouve sur les branches d'instabilité s'exprimant en compression verticale (Cas 2c et 2d), l'algorithme B se montre plus efficace que l'algorithme A. Sur les branches d'instabilités, l'algorithme B a besoin de deux fois plus d'itérations que l'algorithme A pour résoudre l'équilibre mé-

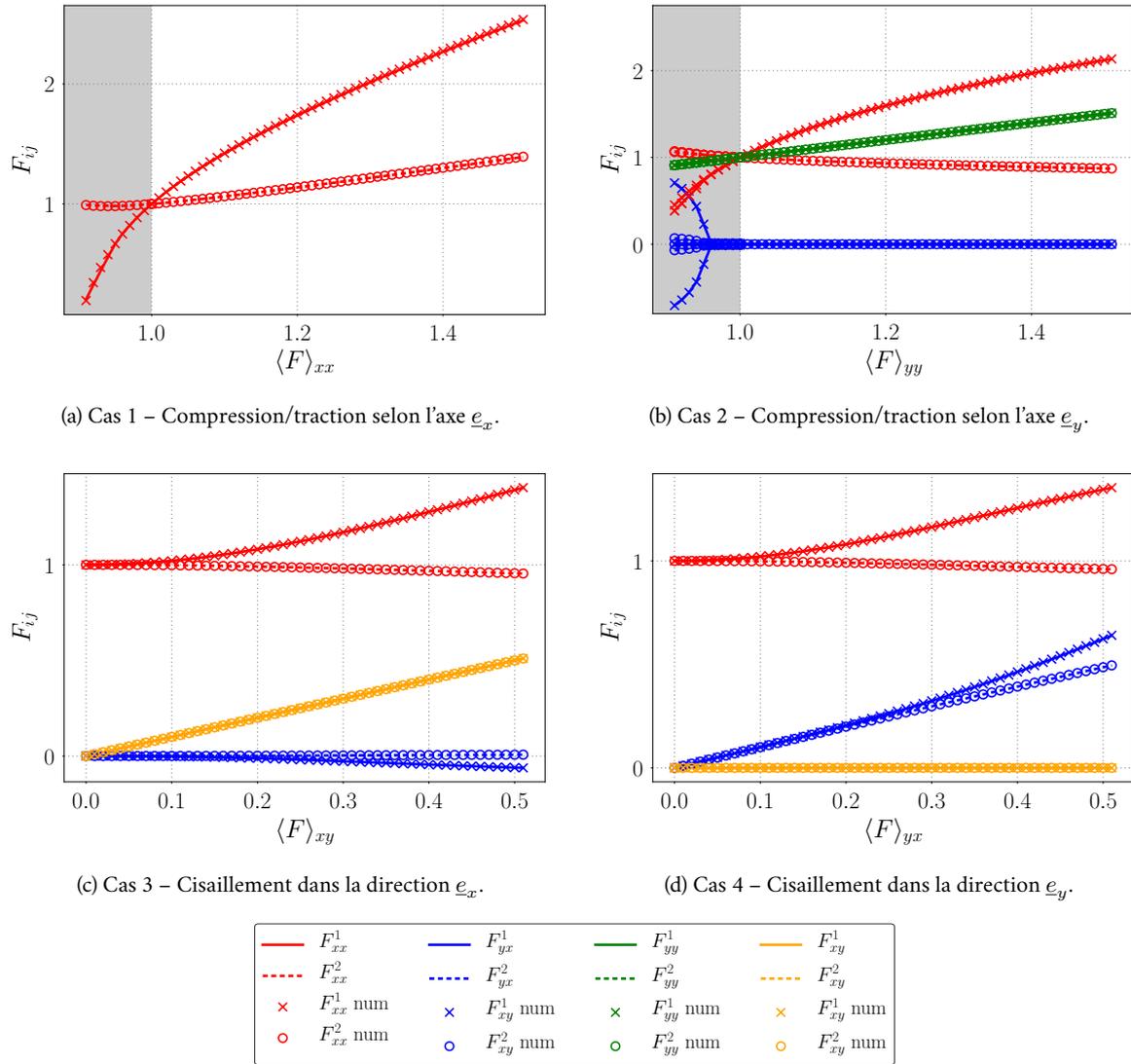


FIGURE 3.4 – Comparaison de l'évolution des composantes $F_{ij}^{(i)}$ dans chacune des phases (i) entre solutions de référence (traits pleins et pointillés) et numérique (symboles), pour des types et amplitudes de chargement différents (cas sans prise en compte de déformation libre).

canique dans les cas 2c et 2d, mais permet d'atteindre des valeurs de divergence des contraintes plus faibles (figure 3.7 et figure 3.8).

La comparaison des algorithmes A et B montre que tous deux permettent d'atteindre un équilibre mécanique satisfaisant pour une valeur de tolérance $\epsilon_{eq} = 10^{-4}$. Dans la majorité des cas, à tolérance donnée, l'algorithme B permet d'atteindre un équilibre mécanique de meilleure qualité en un nombre d'itérations plus faible que l'algorithme A.

3.3.1.3 Prise en compte d'un tenseur de déformation libre

On souhaite à présent étendre la solution analytique présentée dans la Section 3.3.1.1 à la présence d'un tenseur de déformation libre F_{\sim}^* dans la phase 1. Ce type de problème n'est pas étudié par Kabel

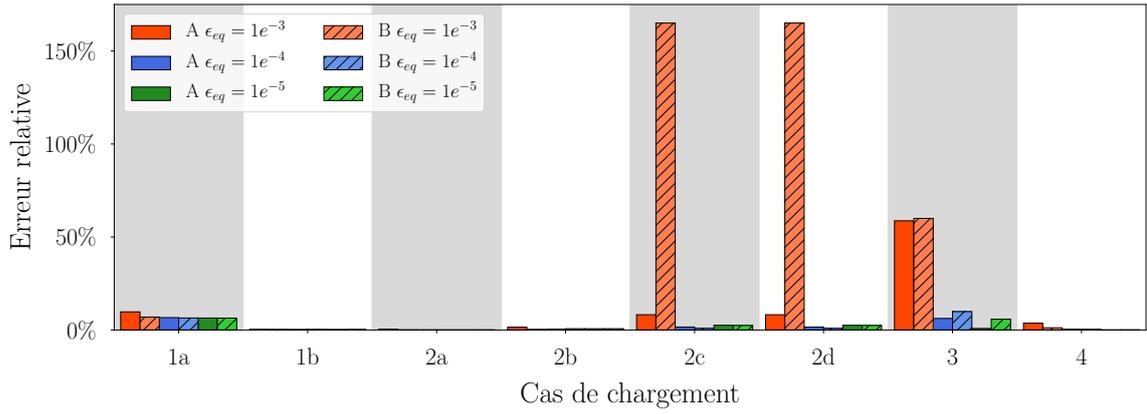


FIGURE 3.5 – Comparaison des valeurs des erreurs relatives entre les solutions numériques obtenues avec l’algorithme A et l’algorithme B (hachuré), pour des valeurs de tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-3} , 10^{-4} et 10^{-5} .

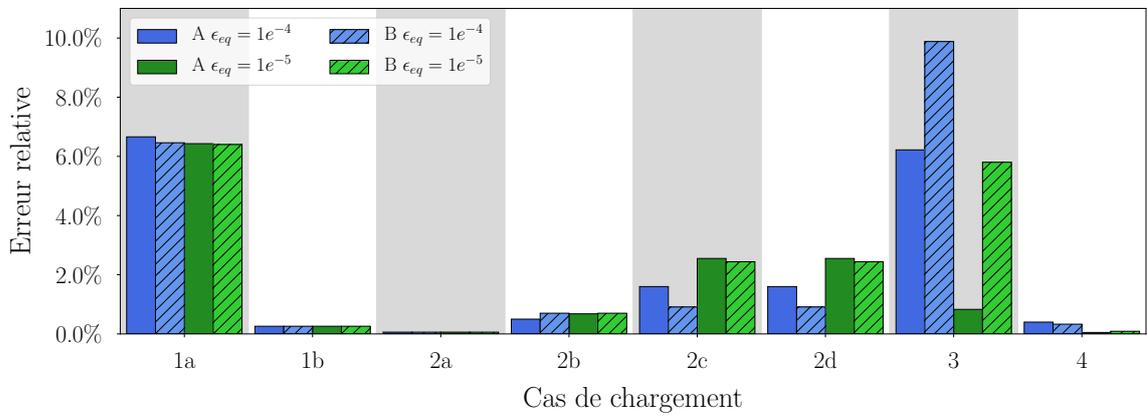


FIGURE 3.6 – Comparaison des valeurs des erreurs relatives entre les solutions numériques obtenues avec l’algorithme A et l’algorithme B (hachuré), pour des valeurs de tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-4} et 10^{-5} .

et al. [2014], contrairement au cas précédent. Cette modification implique la relation suivante (voir Section 3.1) :

$$\tilde{F}^{(1)} = \tilde{F}^{e(1)} \cdot \tilde{F}^* \quad (3.81)$$

Les composantes du tenseur des contraintes $\tilde{P}^{(1)}$ s’expriment à l’aide de la relation suivante (voir équation (3.28)) :

$$P_{ij}^{(1)} = F_{ik}^{e(1)} \pi_{kl}^{e(1)} F_{lj}^{*-T} \quad (3.82)$$

L’algorithme de Newton-Raphson présenté à la Section 3.3.1.1 est alors réécrit en prenant en compte cette modification. Une solution de référence est calculée avec les mêmes paramètres que précédemment (voir tableau 3.2) pour une déformation moyenne fixe valant $\langle \tilde{F} \rangle = \mathbb{I}$. On fait alors varier l’amplitude des déformations libres F_{ij}^* agissant dans la phase (1). Quatre cas sont étudiés :

- F_{xx}^* variant de $-0,9$ à $1,5$.
- F_{yy}^* variant de $-0,9$ à $1,5$.

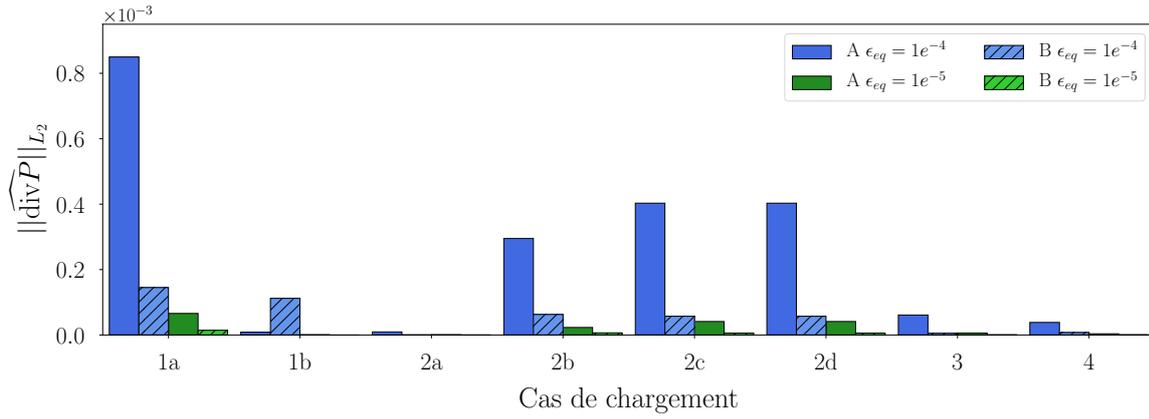


FIGURE 3.7 – Comparaison des valeurs de la norme L_2 de la divergence des contraintes obtenues avec l’algorithme A et l’algorithme B (hachuré), pour des valeurs de tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-4} et 10^{-5} .

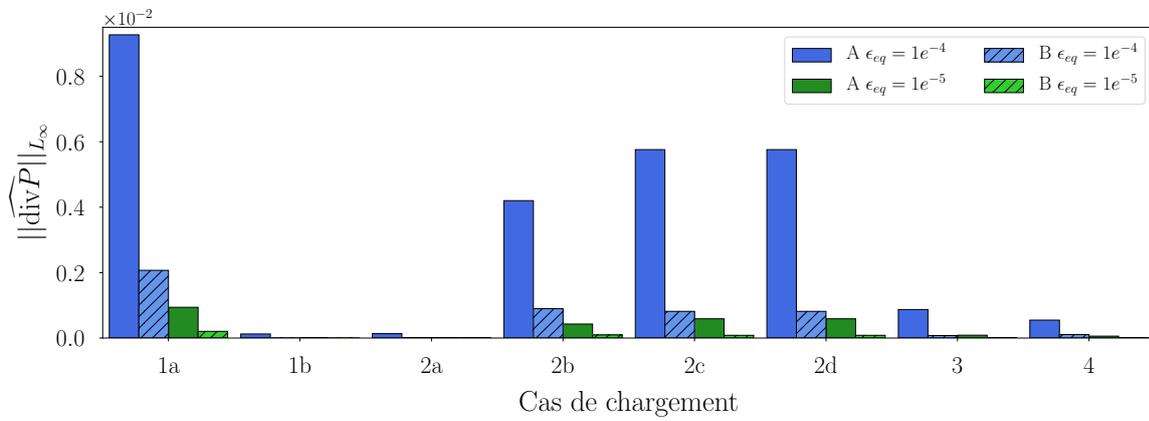


FIGURE 3.8 – Comparaison des valeurs de la norme L_∞ de la divergence des contraintes obtenues avec l’algorithme A et l’algorithme B (hachuré), pour des valeurs de tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-4} et 10^{-5} .

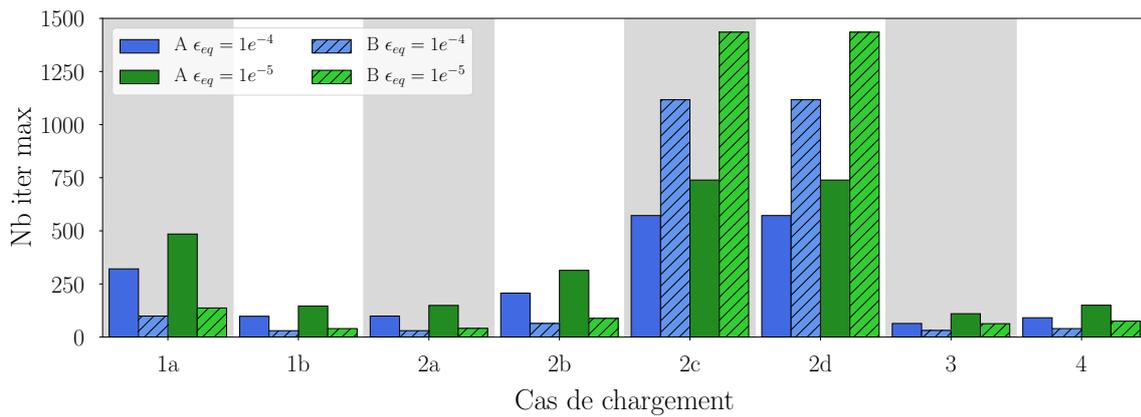


FIGURE 3.9 – Comparaison du nombre d’itérations nécessaire pour des valeurs de tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-4} et 10^{-5} pour les algorithmes A et B.

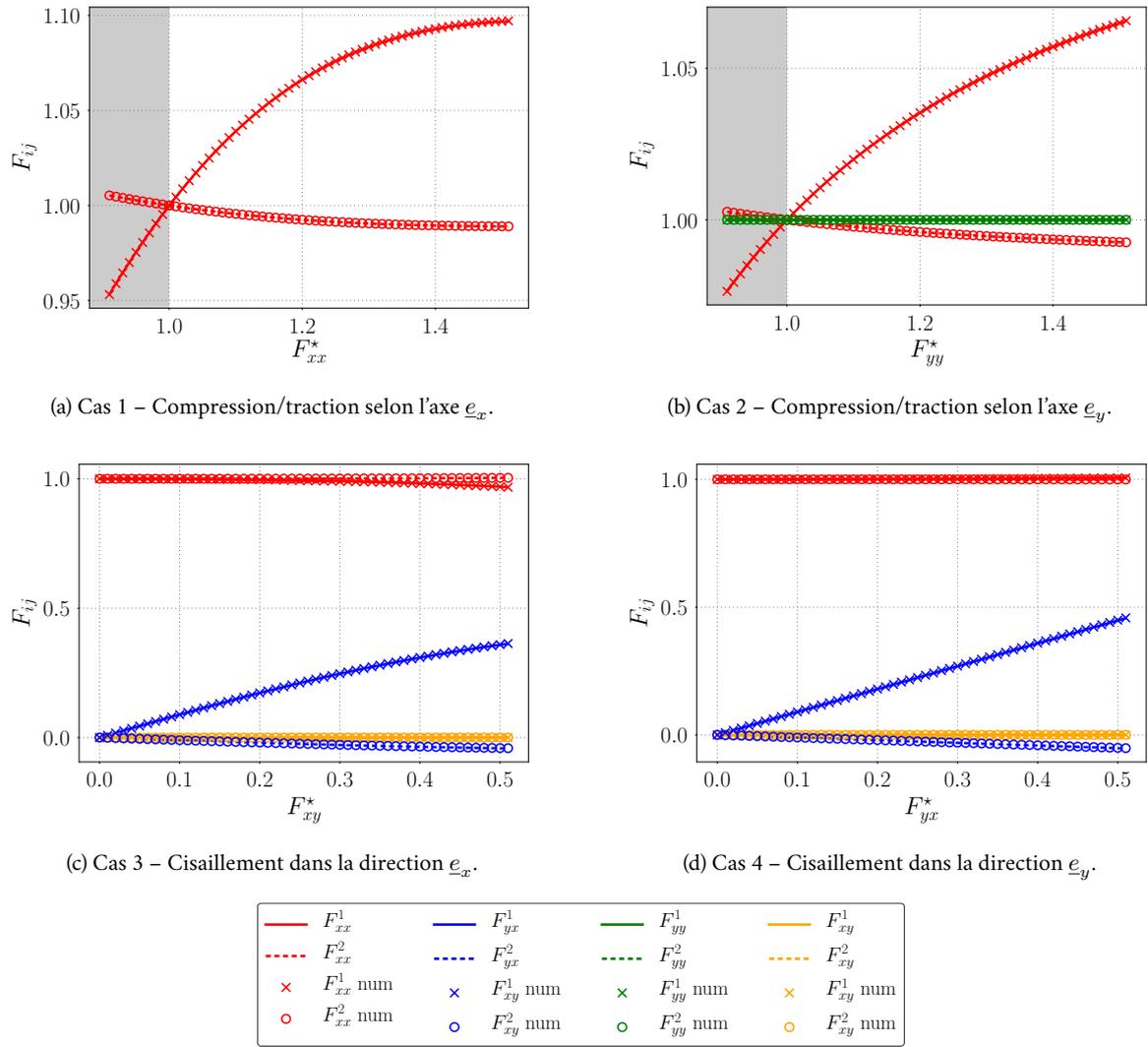


FIGURE 3.10 – Comparaison de l'évolution des composantes $F_{ij}^{(i)}$ dans chacune des phases (i) entre solutions de référence (traits pleins et pointillés) et numérique (symboles), pour des types et amplitudes de chargement différents. Des composantes de tenseur de déformation libre F_{ij}^* différentes sont prises en compte dans la phase (1).

- F_{xy}^* variant de 0 à 0,5 .
- F_{yx}^* variant de 0 à 0,5 .

Pour chacun des cas, une solution numérique est calculée en utilisant l'algorithme B, avec une tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-4} .

La figure 3.10 montre la capacité du solveur mécanique développé à résoudre un équilibre mécanique dans le cas d'un problème hétérogène présentant des constantes élastiques par phase fortement inhomogènes et un tenseur de déformation libre au sein d'une des phases. Ce cas nous intéresse notamment car il est au coeur de la modélisation champ de phase du maillage mécanique présenté dans le Chapitre 4.

De plus, il sert de base à la création d'un outil permettant de calculer la variation de l'énergie élastique d'un milieu biphasé laminé en fonction de l'orientation de l'interface séparant les deux phases dans le

cadre géométriquement non-linéaire (voir [Section 4.2.4](#)).

Cependant, ce cas-test reste simple à résoudre du fait que les déformations sont homogènes par phase et que la géométrie n'induit pas de problèmes numériques aux interfaces ([Valdenaire \[2016\]](#)). Le cas-test suivant est proposé pour étudier le comportement du solveur dans le cas d'une inclusion dans une matrice, où les champs mécaniques ne sont pas homogènes par phase. Celui-ci sera traité en contraintes appliquées.

3.3.2 Problème d'Eshelby : précipité sphérique dans un milieu fini sphérique

Dans cette section, on cherche à résoudre l'équilibre mécanique statique dans un système isotrope composé d'une inclusion sphérique qui se dilate dans un milieu fini sphérique. Ce problème a déjà été traité de manière analytique dans la littérature dans le cadre de l'hypothèse des petites perturbations ([Eshelby \[1957\]](#), [Mura \[1987\]](#)). Cette solution sera utilisée comme solution de référence à laquelle on comparera une solution que l'on calcule à l'aide du solveur développé dans la [Section 3.2](#). Ce dernier étant exprimé dans le cadre géométrique non-linéaire, il est nécessaire de considérer des niveaux de déformations faibles pour qu'une comparaison reste applicable.

3.3.2.1 Construction de la solution de référence

On considère le cas d'une inclusion sphérique de rayon R_i et de constantes élastiques (μ', K') se dilatant au centre d'un milieu sphérique fini de rayon R_f constantes élastiques (μ, K) (que l'on nommera matrice). Nous utiliserons ici les coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) . Le problème étant à symétrie sphérique, le champ de déplacement \underline{u} sera radial et ne dépendra que de r :

$$\underline{u}(r, \theta, \phi) = \underline{u}(r) = u_r(r) \underline{e}_r, \quad (3.83)$$

où \underline{e}_r est un vecteur radial unitaire. En géométrie linéaire, l'équilibre mécanique prend alors la forme (voir par ex. [Landau et Lifshitz \[1990\]](#)) :

$$\underline{\text{grad}} [\text{div} (\underline{u}(r, \theta, \phi))] = 0, \quad (3.84)$$

ce qui conduit à :

$$\underline{u}(r) = u_r(r) \underline{e}_r = \left(Ar + \frac{B}{r^2} \right) \underline{e}_r, \quad (3.85)$$

où A et B sont deux constantes qu'il faut identifier à l'aide des conditions aux limites, de la compatibilité cinématique et de la continuité du vecteur contrainte à l'interface. On peut alors déterminer les différents champs mécaniques dans l'inclusion ($r \leq R_i$) et dans la matrice ($R_i \leq r \leq R_f$). Un tenseur de déformation libre diagonal $\underline{\varepsilon}^0 = \varepsilon^0 \underline{\mathbb{I}}$ est pris en compte dans l'inclusion sphérique pour rendre compte d'une dilatation.

La solution dans l'inclusion (exposant (i)) est limitée à la partie non divergente de l'équation (3.85) :

$$u_r^{(i)} = A_i r, \quad (3.86)$$

ce qui conduit aux champs de déformation et de contrainte suivants :

$$\varepsilon_{rr}^{(i)} = \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)} = A_i, \quad (3.87)$$

$$\sigma_{rr}^{(i)} = \sigma_{\theta\theta}^{(i)} = 3K' (A_i - \varepsilon^0).$$

Dans la matrice (exposant (m)), on a la solution suivante :

$$u_r^{(m)} = A_m r + \frac{B_m}{r^2}, \quad (3.88)$$

ce qui conduit aux champs de déformation et de contrainte suivants :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{rr}^{(m)} &= A_m - 2\frac{B_m}{r^3}, & \varepsilon_{\theta\theta}^{(m)} &= A_m + \frac{B_m}{r^3}, \\ \sigma_{rr}^{(m)} &= 3K A_m - 4\frac{\mu B_m}{r^3}, & \sigma_{\theta\theta}^{(m)} &= 3K A_m + 2\frac{\mu B_m}{r^3}. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Les constantes A_i , A_m et B_m sont obtenues à l'aide :

- des conditions aux limites : on considère des contraintes nulles au bord du système, ce qui se traduit par :

$$\sigma_{rr}(r = R_f) = 0.$$

- de la compatibilité cinématique : \underline{u} doit être continu à l'interface, ce qui se traduit par :

$$u_r^{(i)}(r = R_i) = u_r^{(m)}(r = R_i).$$

- de la continuité du vecteur contraintes à l'interface (denormale \underline{e}_r) :

$$\sigma_{rr}^{(i)}(r = R_i) = \sigma_{rr}^{(m)}(r = R_i).$$

On obtient alors les expressions des trois constantes permettant de définir entièrement la solution du problème :

$$\begin{aligned} A_i &= \left(\frac{4\mu\mathcal{X}}{3} \frac{1}{R_f^3} + \frac{1}{R_i^3} \right) B_m, \\ A_m &= \frac{4\mu\mathcal{X}}{3} \frac{B_m}{R_f^3}, \\ B_m &= \frac{\varepsilon^0}{\frac{1}{R_f^3} \frac{4\mu}{3} (\mathcal{X} - \mathcal{X}') + \frac{1}{R_i^3} \left(1 + \frac{4\mu}{3} \mathcal{X}' \right)}, \end{aligned} \quad (3.90)$$

avec $\mathcal{X} = \frac{1}{K}$ et $\mathcal{X}' = \frac{1}{K'}$.

La comparaison de la solution obtenue avec la solution numérique est faite sur les profils de contraintes σ_{rr} et $\sigma_{\theta\theta}$ dans le cadre de petites déformations ($\varepsilon^0 = 0,2\%$).

3.3.2.2 Calcul de la solution numérique

Dans cette partie, des profils de contraintes obtenus dans le cas d'un précipité sphérique dans un milieu sphérique fini sont comparés à ceux obtenus dans le cas d'un précipité sphérique dans une boîte de simulation cubique, avec conditions aux limites périodiques. Pour que ces deux situations soient comparables, on considère une situation où le précipité est suffisamment petit dans la boîte de simulation.

Taille de la boîte de simulation	256 × 256 × 256 nm	
Discrétisation	200 × 200 × 200 nuds	
Rayon de l'inclusion R_i	12,8 nm	
Rayon R_f	128 nm	
Cas homogène (GPa)	λ	500
	μ	250
	K	666,67
Cas inhomogène (GPa)	λ	500
	μ	250
	K	666,67
	λ'	100
	μ'	50
	K'	133,33

TABLEAU 3.5 – Paramètres numériques utilisés pour le calcul des solutions analytique et numérique dans le cas du problème d'Eshelby.

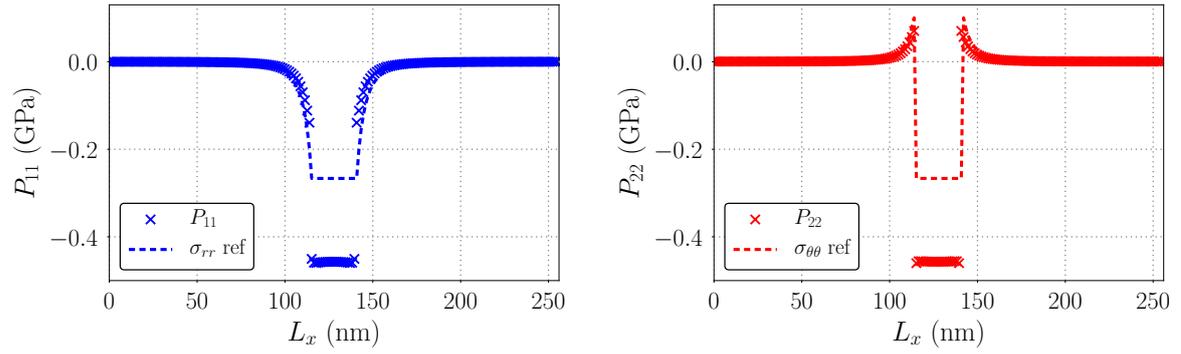
Deux cas sont étudiés : le cas de constantes élastiques homogènes ($\mu = \mu'$ et $\lambda = \lambda'$) ainsi qu'un cas hétérogène ($\mu = 5\mu'$ et $\lambda = 5\lambda'$). Les paramètres d'entrée de la simulation numérique sont présentés dans le [tableau 3.5](#).

La solution numérique est tout d'abord calculée dans le cas homogène en considérant l'algorithme B ($\lambda \approx \lambda^0$, b) avec une tolérance $\epsilon_{eq} = 10^{-4}$. Cette valeur de tolérance est choisie conformément au cas-test précédent, où la qualité de l'équilibre mécanique obtenue était alors satisfaisante (voir [Section 3.3.1](#)).

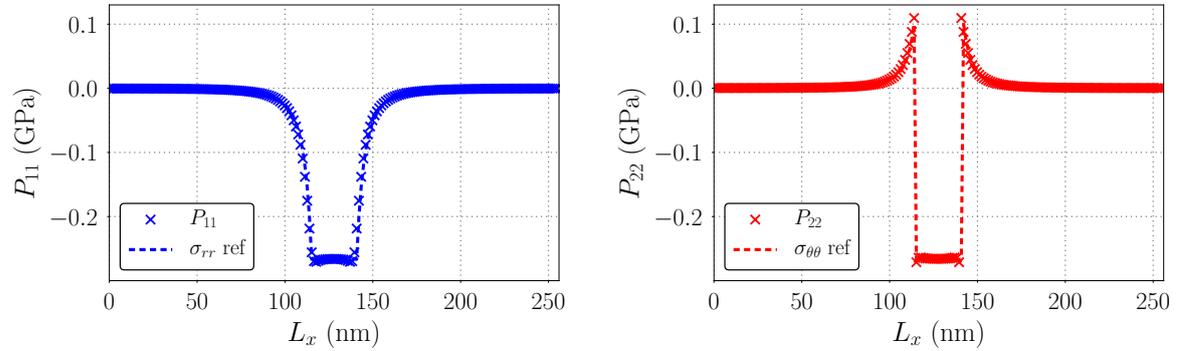
Dans ce cas, l'équilibre mécanique est résolu en 5 itérations mais la valeur de la norme L_∞ de la divergence de \underline{P} vaut 1,7, ce qui est 3 ordres de grandeur supérieur aux valeurs observées dans le cas du laminé ([figure 3.8](#)). Sur la [figure 3.11](#), les tracés des profils de contraintes P_{11} et P_{22} le long de l'axe e_x de la simulation sont comparés respectivement aux profils de contraintes σ_{rr} et $\sigma_{\theta\theta}$ de la solution analytique calculées dans la [Section 3.3.2.1](#). On note alors des écarts de près de 70% entre la valeur des contraintes numériques et analytiques obtenues dans l'inclusion. La valeur importante de la norme de la divergence des contraintes montre que cet écart est dû au fait que la précision sur l'équilibre mécanique est mauvaise lorsque la tolérance ϵ_{eq} vaut 10^{-4} .

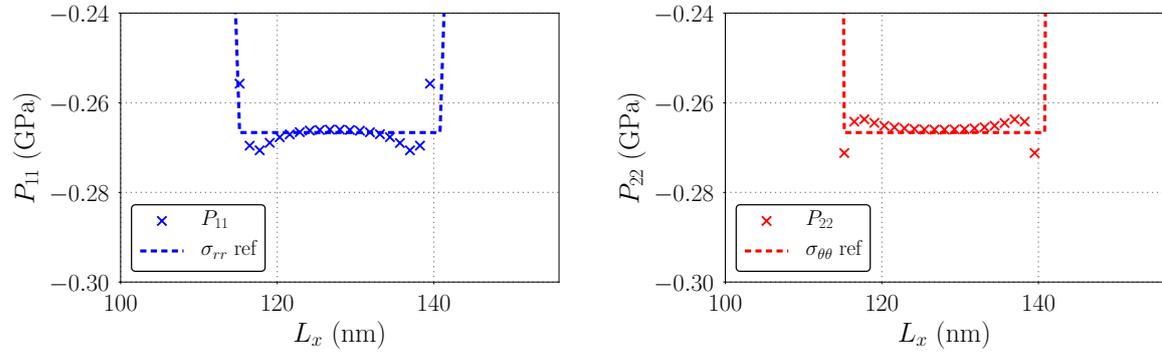
La [figure 3.12](#) montre les résultats obtenus pour une tolérance ϵ_{eq} égale à 10^{-8} . L'équilibre mécanique statique est dans ce cas résolu en 42 itérations, et la norme L_∞ de la divergence des contraintes est de 9×10^{-4} (voir [tableau 3.6](#)). On note que l'écart entre la solution de référence et la solution numérique réside à présent au niveau de l'interface.

Deux facteurs sont à prendre en considération pour expliquer cet écart. Tout d'abord, la discrétisation de l'interface sensée être parfaitement courbe dans le cas d'une sphère provoque un "bump" de contraintes à l'interface. Le second effet à prendre en considération est l'apparition d'oscillations à l'in-


 (a) Comparaison de P_{11} le long de l'axe \underline{e}_x et σ_{rr} analytique.

 (b) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique.

 FIGURE 3.11 – Comparaison des profils de contraintes numérique et analytique avec une tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-4} .

 (a) Comparaison de P_{11} le long de l'axe \underline{e}_x et σ_{rr} analytique.

 (b) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique.

 (c) Comparaison de P_{11} le long de l'axe \underline{e}_x et σ_{rr} analytique – Zoom sur inclusion.

 (d) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique – Zoom sur inclusion.

 FIGURE 3.12 – Comparaison des profils de contraintes numérique et analytique avec une tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-8} .

terface (visible sur la [figure 3.12d](#)) dans le cas de l'utilisation de solveurs à méthode spectrale sur un problème à interface abrupte ([Valdenaire \[2016\]](#)). Une des façons permettant d'éviter ce problème est de considérer une interface lissée ou ("smooth"), permettant de régulariser les champs à l'interface.

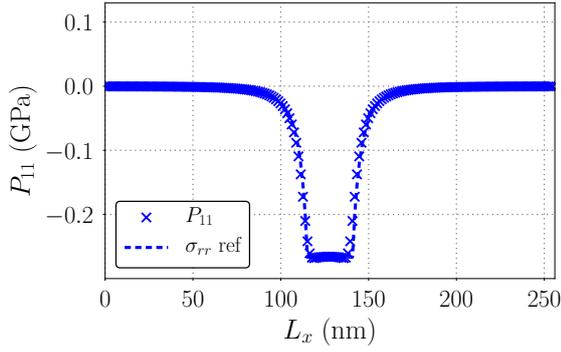
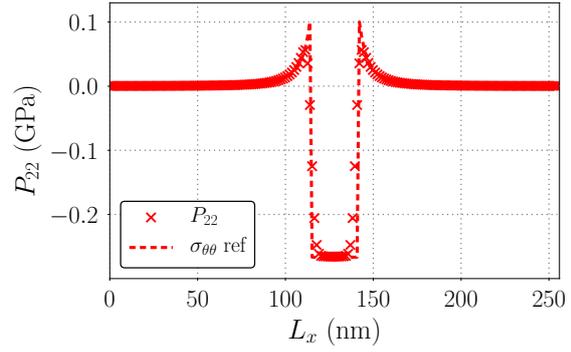
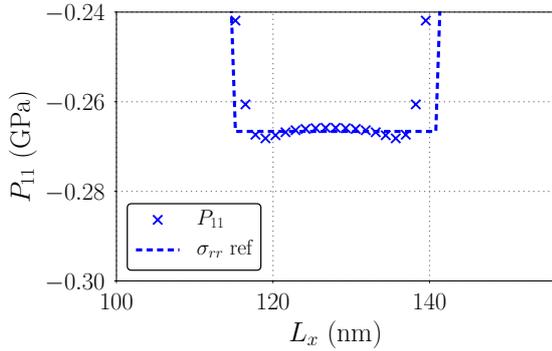
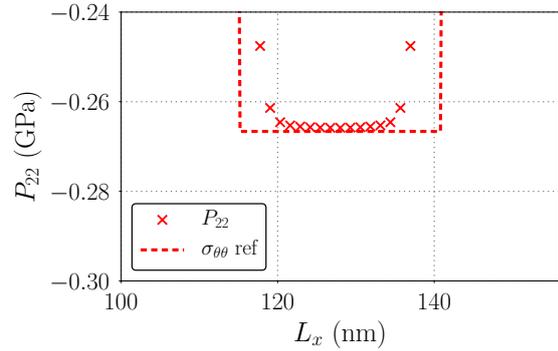
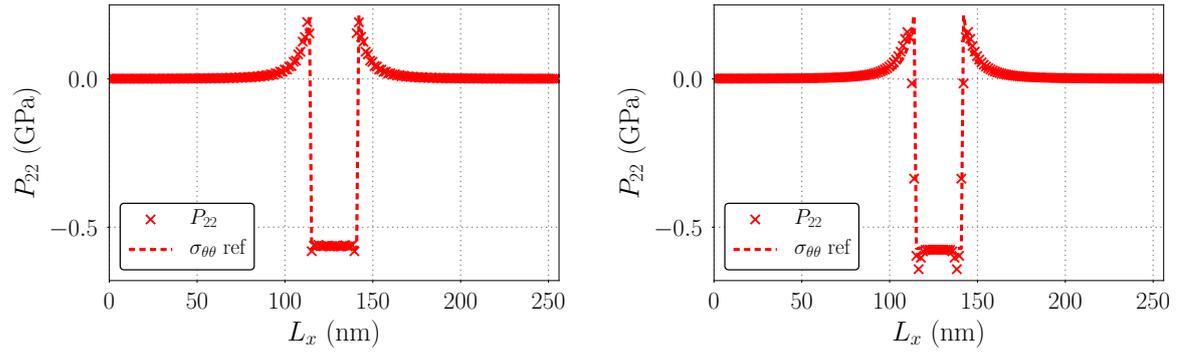

 (a) Comparaison de P_{11} le long de l'axe \underline{e}_x et σ_{rr} analytique.

 (b) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique.

 (c) Comparaison de P_{11} le long de l'axe \underline{e}_x et σ_{rr} analytique – Zoom sur inclusion.

 (d) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique – Zoom sur inclusion.

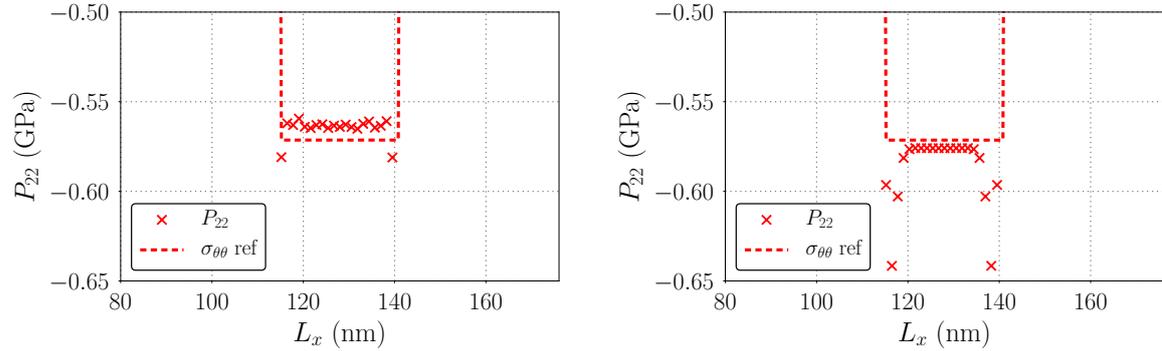
 FIGURE 3.13 – Comparaison des profils de contraintes numérique et analytique avec une tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-8} . L'interface entre l'inclusion sphérique et la matrice est ici lissée sur environ 8 nœuds.

Cette méthode s'adapte bien à une application sur un modèle champ de phase continu, présentant une interface lisse de quelques nœuds entre deux phases. La [figure 3.13](#) regroupe les résultats obtenus dans le cadre de la considération d'une interface lissée sur 8 nœuds à l'interface.

Le cas inhomogène présenté dans le [tableau 3.5](#) est également traité et une comparaison entre les résultats avec interface lisse et abrupte sont présentés sur la [figure 3.14](#). Dans ce cas, on note que les résultats avec interface abrupte montre un nombre important d'oscillations et une augmentation de leur amplitude au niveau de la valeur du champ mécanique dans l'inclusion ([figure 3.14c](#)). Le fait de lisser la courbe permet de stabiliser le champ dans l'inclusion ([figure 3.14d](#)), sans pour autant diminuer le “bump” au niveau de l'interface.

Les détails numériques tels que le nombre d'itérations et la valeur de la norme L_∞ de la divergence des contraintes dans chacun des cas ici étudiés sont rapportés dans le [tableau 3.6](#). On y retrouve également les résultats obtenus en utilisant l'algorithme A. On remarque notamment une diminution de la qualité de l'équilibre mécanique entre les cas homogène et hétérogène, induit par l'apparition d'un nombre important d'oscillations sur les champs mécaniques dans le cas hétérogène. On note aussi que,


 (a) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique – Interface abrupte.

 (b) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique – Interface lissée.

 (c) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique – Interface abrupte – Zoom sur inclusion.

 (d) Comparaison de P_{22} le long de l'axe \underline{e}_x et $\sigma_{\theta\theta}$ analytique – Interface lissée – Zoom sur inclusion.

 FIGURE 3.14 – Comparaison des profils de contraintes numérique et analytique avec une tolérance ϵ_{eq} valant 10^{-8} dans le cas inhomogène. (a) et (c) : interface abrupte, (b) et (d) : interface lissée sur environ 8 nœuds.

Constantes élastiques	Tolérance ϵ_{eq}	Algorithme	Type d'interface	Nombre d'itération	$\ \text{div}(\underline{P})\ _{L_\infty}$
Homogène	10^{-4}	B	Abrupte	5	$1,68 \times 10^0$
			Lissée	60	$1,6 \times 10^{-3}$
	10^{-8}	A	Abrupte	42	$9,3 \times 10^{-4}$
			Lissée	42	$4,8 \times 10^{-5}$
Hétérogène	10^{-8}	A	Abrupte	70	$3,5 \times 10^{-2}$
			Lissée	66	$7,2 \times 10^{-3}$
	10^{-8}	B	Abrupte	18	$4,3 \times 10^{-2}$
			Lissée	17	$2,6 \times 10^{-3}$

 TABLEAU 3.6 – Détails des résultats numériques : nombre d'itération nécessaire et norme L_∞ de la divergence des contraintes pour les différents cas étudiés dans la Section 3.3.2.

dans le cas homogène, le nombre d'itérations nécessaire à l'atteinte du critère d'arrêt est de l'ordre de 40 à 60. Cela est dû aux conditions initiales prises en compte dans le solveur dans le cas de contraintes

appliquées (voir [tableau 3.1](#)). Dans le formalisme géométriquement linéaire, dans le cas homogène, la solution est analytique dans l'espace de Fourier. Cette solution pourrait être utilisée pour améliorer le choix des conditions initiales pour de faibles inhomogénéités. Ainsi, un travail supplémentaire sur les conditions initiales permettrait une amélioration de l'efficacité du solveur.

3.4 Conclusion

Ce chapitre a permis de mettre en place un solveur par méthode spectrale permettant le calcul de l'équilibre mécanique en géométrie non-linéaire. Le solveur est nécessaire à la simulation de la croissance de macles mécaniques pour lesquelles les cisaillements sont importants.

Le solveur est écrit sous forme d'un point fixe et est similaire à l'approche proposée dans la littérature ([Kabel et al. \[2014\]](#), [Eisenlohr et al. \[2013\]](#)). Il diffère toutefois sur les points suivants :

- notre point fixe est basé sur les champs de déplacement et non sur les champs de gradient de transformation. En travaillant directement sur les degrés de liberté du problème, on assure directement les conditions de compatibilité. De plus, la connaissance des champs de déplacement permet de tracer simplement les configurations dans l'état déformé ;
- nous avons proposé une méthode originale afin de prendre en compte de manière efficace des contraintes moyennes imposées.

Des paramètres numériques importants du point de vue d'une résolution efficace et précise de l'équilibre mécanique ont été discutés, avec notamment le choix du tenseur $\underline{\lambda}^0$ représentatif du milieu de référence, le choix de la valeur de la tolérance à considérer pour le critère d'arrêt, le nombre d'itérations nécessaires à l'atteinte de celui-ci ainsi que la manière d'évaluer la qualité de l'équilibre mécanique atteint. L'ensemble de cette étude porte à choisir l'algorithme B du fait de son efficacité en comparaison à l'algorithme A.

Ainsi, le solveur obtenu est adapté à l'étude par champ de phase de la croissance de macles mécaniques.

Notons toutefois que ce solveur présente des limites avec l'apparition d'oscillations dues à l'instabilité du schéma numérique utilisé si on l'utilise pour des microstructures décrites avec des interfaces étroites ([Valdenaire \[2016\]](#)). Des solutions à ce problème ont été récemment développées (par ex. [Ruffini et al. \[2017\]](#)) mais nécessitent une décomposition en sous-voxels de la grille de discrétisation spatiale. Des travaux sont également en cours de développement au Laboratoire d'Étude des Microstructures utilisant comme point de départ une écriture discrétisée du problème mécanique (A. Finel, à paraître), permettant d'assurer mathématiquement la stabilité du schéma numérique.

CHAPITRE

4

MODÈLE CHAMP DE PHASE DE CROISSANCE DE MACLES MÉCANIQUES DANS LE CADRE GÉOMÉTRIQUEMENT NON-LINÉAIRE

Sommaire

3.1	Modèle élastique en grande déformation	84
3.1.1	Équilibre mécanique	86
3.2	Équilibre mécanique par méthode de point fixe	87
3.2.1	Choix du critère d'arrêt de l'algorithme itératif	91
3.2.2	Choix du milieu de référence homogène	92
3.2.3	Résumé de l'algorithme de résolution de l'équilibre mécanique par méthode spectrale	94
3.3	Validation de la résolution de l'équilibre mécanique	95
3.3.1	Laminé de St-Venant-Kirchhoff	95
3.3.2	Problème d'Eshelby : précipité sphérique dans un milieu fini sphérique	106
3.4	Conclusion	112

Dans ce chapitre, le formalisme champ de phase avec élasticité linéaire présenté dans le [Chapitre 2](#) est réécrit dans le cadre géométriquement non-linéaire. Dans ce cadre, la résolution de l'équilibre mécanique est effectuée à l'aide du solveur par méthode spectrale développé dans le [Chapitre 3](#). On débutera ce chapitre par l'introduction des principales modifications apportées à l'expression de l'énergie élastique et leurs implications sur l'expression de la force motrice élastique dans le modèle champ de phase type Allen-Cahn ([Section 4.1](#)). S'en suivra une comparaison des résultats obtenus avec ceux obtenus dans le cadre géométriquement linéaire, en appuyant notamment sur les différences morphologiques observées ([Section 4.2](#)). Un modèle champ de phase multi-variants est ensuite dérivé, permettant alors d'observer la croissance de plusieurs variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans une microstructure soumise à un chargement mécanique ([Section 4.3](#)). Dans la [Section 4.4](#), l'utilisation de ce dernier modèle pour l'étude de la nucléation autour d'un défaut (type boucle de dislocation ou fissure) est discutée et mise en rapport avec les paramètres champ de phase du modèle. Enfin, le chapitre est conclu par une discussion des principales limites du modèle, avec notamment la problématique de la modélisation du maillage secondaire, sujet abordé plus en détail dans le [Chapitre 5](#).

4.1 Modèle champ de phase de type Allen-Cahn couplé à l'élasticité : cadre géométriquement non-linéaire

Le modèle champ de phase présenté dans ce chapitre est basé sur les mêmes fondements physiques que ceux du modèle Allen-Cahn présenté dans le [Chapitre 2](#). En effet, on considère toujours un modèle champ de phase classique avec interface diffuse où l'énergie libre totale du système \mathcal{F} reste décomposée additivement en un terme \mathcal{F}_{int} et \mathcal{F}_{el} . Le terme \mathcal{F}_{int} , d'origine chimique, reste identique à son expression obtenue dans le [Chapitre 2](#). Ce terme permet de contrôler l'énergie γ et l'épaisseur 2δ de l'interface (voir [équation \(2.20\)](#)). Sauf cas où cela est précisé, on utilise dans ce chapitre les paramètres $\gamma = 4 \text{ J/m}^2$ et $2\delta = 6 \text{ nm}$ identifiés dans le [Chapitre 2](#). Ces paramètres avaient été choisis de manière à assurer, en présence du champ élastique généré par la macle, l'isotropie de l'épaisseur et de la morphologie en tangente hyperbolique de l'interface (voir [Section 2.3.3](#)).

La [Section 3.1](#) du [Chapitre 3](#) a permis de mettre en place le formalisme géométriquement non-linéaire pour le cas de l'élasticité linéaire. Afin d'intégrer ce formalisme à un modèle champ de phase pour le maillage, on s'intéresse à la formulation prenant en compte des déformations inélastiques via une décomposition multiplicative du gradient de transformation $\underline{\underline{F}}$ (voir [Section 3.1](#)). Pour rappel, on a :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^e \cdot \underline{\underline{F}}^*, \quad (4.1)$$

$\underline{\underline{F}}^e$ et $\underline{\underline{F}}^*$ étant respectivement la partie élastique et la partie inélastique du tenseur gradient de transformation. La partie élastique $\underline{\underline{F}}^e$ du gradient de transformation permet alors d'exprimer le tenseur des déformations élastiques de Green-Lagrange $\underline{\underline{\xi}}^e$:

$$\underline{\underline{\xi}}^e = \frac{1}{2}(\underline{\underline{C}}^e - \mathbb{I}), \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{C}}^e = \underline{\underline{F}}^{eT} \cdot \underline{\underline{F}}^e. \quad (4.2)$$

De la même façon que pour le modèle champ de phase de type Allen-Cahn avec élasticité développé dans le [Chapitre 2](#), le potentiel élastique \mathcal{F}_{el} est écrit comme un potentiel quadratique en tenseur des

déformations élastiques $\underline{\varepsilon}^e$. La différence majeure avec la formulation établie dans le [Chapitre 2](#) est le fait que le tenseur des déformations n'est pas linéarisé. En effet, dans ce chapitre, le potentiel élastique \mathcal{F}_{el} s'exprime en fonction du tenseur des déformations élastiques de Green-Lagrange $\underline{\varepsilon}^e$:

$$\mathcal{F}_{el} = \int_{\Omega} f_{el} dV = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \underline{\varepsilon}^e : \underline{\lambda} : \underline{\varepsilon}^e - \underline{P}^{app} : \langle \underline{F}^T \rangle dV, \quad (4.3)$$

avec \underline{P}^{app} le tenseur des contraintes appliquées type Piola-Kirchhoff 1 (ou Boussinesq).

Dans le cas du maillage mécanique étudié, la partie inélastique du tenseur gradient de transformation \underline{F}^* joue le rôle de tenseur de déformation libre, et est associé au cisaillement induit par la présence d'une macle mécanique de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Dans une modélisation en champ de phase, ce tenseur est exprimé comme une fonction du champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ localisant un variant de macle au sein d'une microstructure (voir [équation \(2.1\)](#)). Dans le cas du variant de macle numéro 1 ($i = 1$), en gardant les mêmes notations que dans les chapitres précédents, on écrit :

$$\underline{F}^*(\varphi) = \underline{\mathbb{I}} + h(\varphi) \nabla \underline{u}^{0(1)} \quad \text{et} \quad \nabla \underline{u}^{0(1)} = \gamma_{tw} \left(\underline{\tilde{\eta}}_1^{(1)} \otimes \underline{\tilde{K}}_1^{(1)} \right), \quad (4.4)$$

où $\nabla \underline{u}^{0(i)}$ est le gradient de déplacement intrinsèque au mode de maillage, i est relatif au variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ considéré, $\gamma_{tw} = \sqrt{2}/4$ est la valeur caractéristique du cisaillement associé au mode de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, $\underline{\tilde{\eta}}_1^{(1)}$ est le vecteur unitaire dans la direction de cisaillement $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{\tilde{K}}_1^{(1)}$ le vecteur unitaire dans la direction normale au plan de maillage $\underline{K}_1^{(1)}$. On note l'utilisation de la fonction d'interpolation $h(\varphi)$ définie dans l'[équation \(2.57\)](#) et dont l'utilité est discutée dans la [Section 2.3.3](#) du [Chapitre 2](#). De la même façon que dans le [Chapitre 2](#), cette fonction est utilisée pour interpoler le tenseur de déformation libre (ici $\nabla \underline{u}^0$) et le tenseur des constantes élastiques $\underline{\lambda}$ sur les champs $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ (voir [équation \(2.60\)](#)). Le choix de cette fonction a des effets importants sur la possibilité de faire apparaître des germes de macles mécaniques au sein du système et sera discuté dans la [Section 4.4](#).

Dès lors que l'on a défini l'ensemble des composants du potentiel élastique exprimé dans l'[équation \(4.3\)](#), on peut calculer la force motrice $\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi}$ liée au potentiel élastique dans le cadre géométriquement non-linéaire. Dans le cas où l'on considère une microstructure avec un seul champ de phase $\varphi(\underline{\mathcal{X}}, t)$ lié à un variant de macle, on obtient :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \underline{\varepsilon}^e : h'(\varphi) \left(\underline{\lambda}^{(1)} - \underline{\lambda}^{(m)} \right) : \underline{\varepsilon}^e - \underline{\mathcal{S}} : \left[\underline{\mathcal{C}}^e \cdot h'(\varphi) \nabla \underline{u}^{0(1)} \cdot (\underline{F}^*)^{-1} \right], \quad (4.5)$$

où $\underline{\lambda}^{(1)}$ et $\underline{\lambda}^{(m)}$ sont respectivement les constantes élastiques dans le variant de macle 1 et dans la matrice, et $\underline{\mathcal{S}}$ est le deuxième tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff (défini dans l'[équation \(3.16\)](#)). Le détail du calcul aboutissant à l'[équation \(4.5\)](#) est donné dans l'[Annexe D](#).

Vu que l'on considère le même potentiel relatif à l'énergie d'interface \mathcal{F}_{int} que celui exprimé dans le [Chapitre 2](#), la force motrice $\frac{\delta \mathcal{F}_{int}}{\delta \varphi}$ s'exprime comme précédemment :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{int}}{\delta \varphi} = W g'(\varphi) - \alpha \Delta \varphi, \quad (4.6)$$

où W est l'échelle de densité d'énergie de la fonction double-puits $g(\varphi)$ et α est le coefficient du terme de gradient $|\nabla\varphi|^2$ (voir Section 2.1.1). À noter que l'on peut exprimer cette force motrice en fonction du couple de paramètres (γ, δ) qui représentent l'énergie et l'épaisseur des interfaces, à l'aide des relations (2.11) et (2.19).

L'ensemble des forces motrices mises en jeu dans le système composé d'un variant de macle, localisé par un champ de phase $\varphi(\underline{x}, t)$, dans une matrice a ainsi été exprimé dans le cadre géométriquement non-linéaire. La loi d'évolution spatio-temporelle du champ $\varphi(\underline{x}, t)$ est, comme au Chapitre 2, une simple relaxation (équation (2.39)). À chaque pas de temps d'évolution du champ $\varphi(\underline{x}, t)$, l'équilibre mécanique est résolu à l'aide de l'algorithme de résolution par méthode spectrale présenté dans le Chapitre 3. Les champs mécaniques sont alors mis à jour et introduits dans le calcul de la force motrice élastique.

On voit alors que la formulation du modèle champ de phase de l'évolution d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ au sein de la matrice initiale est peu modifiée lors du passage d'un cadre géométriquement linéaire (CGL) à un cadre géométriquement non-linéaire (CGNL). Seules la force motrice d'origine élastique et la résolution de l'équilibre mécanique sont changées. Dans la section suivante, ce nouveau modèle est appliqué à la croissance d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Une comparaison des résultats obtenus avec ceux du modèle formulé dans le CGL est également présentée.

4.2 Comparaison des microstructures obtenues dans le CGL et le CGNL : modèle mono-variant

Dans cette section, le modèle champ de phase type Allen-Cahn avec élasticité formulée dans le CGNL est appliqué au cas de la croissance d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ au sein d'une matrice. On s'intéresse notamment à l'effet de cette nouvelle formulation sur l'anisotropie de croissance, sans prise en compte d'une énergie d'interface anisotrope. Pour cela, trois configurations de germes initiaux seront étudiées : sphérique, ellipsoïde allongé dans la direction de cisaillement $\underline{\eta}_1$ et ellipsoïde allongé dans la direction normale au plan de maillage \underline{K}_1 . On s'intéresse alors à la croissance de ces germes initiaux dans le cas du cadre géométriquement linéaire (CGL) et du cadre géométriquement non-linéaire (CGNL). Pour l'instant, on ne considère qu'un seul variant, que l'on note (1). Cette notation sera retrouvée en exposant sur les différentes entités relatives à ce variant de macle.

4.2.1 Conditions initiales

Afin de mettre en valeur les différences induites par le choix du formalisme élastique choisi (CGL ou CGNL), on considère l'étude de la croissance de trois germes de macle initiaux de morphologies différentes. Ces trois germes de macles correspondent au variant (332) $[11\bar{3}]$ noté (1), dont la direction de cisaillement est $\underline{\eta}_1^{(1)} = [11\bar{3}]$, la normale au plan de maillage est $\underline{K}_1^{(1)} = [332]$, et la normale au plan de cisaillement est $\underline{P}^{(1)} = [1\bar{1}0]$.

Les trois germes de macle initiaux sont représentés sur la figure 4.1. Les axes définissant la boîte de simulation cubique correspondent aux directions cristallographiques $\underline{\eta}_1^{(1)}$, $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{P}^{(1)}$. Le premier

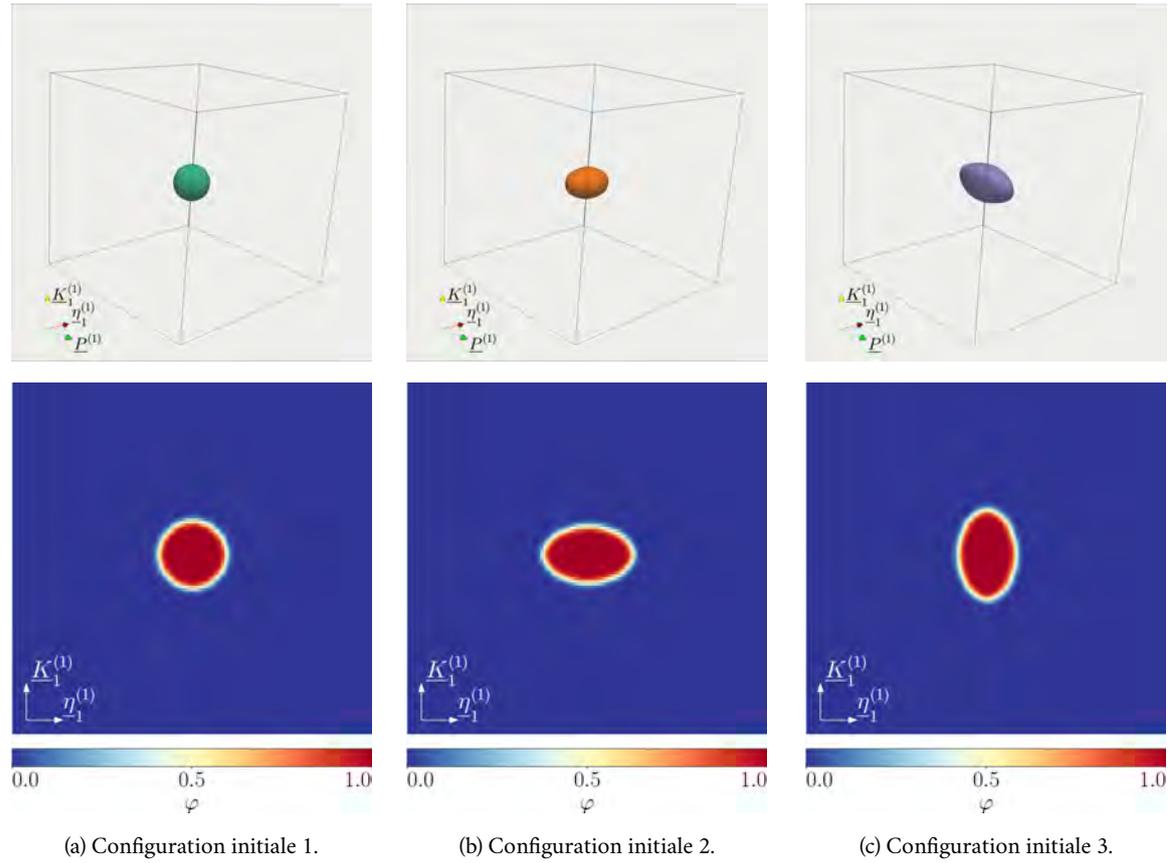


FIGURE 4.1 – Configurations initiales des calculs réalisés dans la Section 4.2. Colonnes (a), (b) et (c) : configurations initiales 1, 2 et 3. Ligne du haut : représentation 3D de l’isosurface $\varphi = 0,5$. Ligne du bas : section $\underline{P}^{(1)}$ du champ φ passant par le centre de la boîte de simulation.

cas (Configuration 1) correspond à un germe sphérique de rayon $R_0 = 12$ nm (figure 4.1a). Il s’agit du germe initial considéré dans la Section 2.4, pour lequel la contrainte de traction (amplitude et axe) permettant sa croissance avait été identifiée. Le second germe (Configuration 2) est un ellipsoïde allongé selon $\underline{\eta}_1^{(1)}$, dont les demi-axes le long des directions $\underline{\eta}_1^{(1)}$, $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{P}^{(1)}$ sont égaux à $a = 16$ nm, $b = 10$ nm et $c = 12$ nm. Enfin, le dernier germe (Configuration 3) est également un ellipsoïde, allongé selon $\underline{K}_1^{(1)}$, dont les demi-axes le long des directions $\underline{\eta}_1^{(1)}$, $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{P}^{(1)}$ sont égaux à $a = 10$ nm, $b = 16$ nm et $c = 12$ nm. On note que les demi-axes le long de la direction $\underline{P}^{(1)}$ des différents germes initiaux sont identiques.

Ce choix de conditions initiales se rapproche de celui fait dans la Section 2.4.4 où l’on avait vu qu’en 2D, pour le cas d’un formalisme élastique exprimé dans le CGL, la morphologie finale de la macule était influencée par la configuration initiale. En fonction de cette dernière, on pouvait observer une croissance favorisant la présence d’une interface normale à $\underline{K}_1^{(1)}$ (figure 2.27), normale à $\underline{\eta}_1^{(1)}$ (figure 2.28), ou encore voir une compétition entre ces deux interfaces (figure 2.25, sans anisotropie d’énergie d’interface).

4.2.2 Paramètres d'entrée des modèles champ de phase avec élasticité

Dans les deux formalismes ici étudiés, les paramètres relatifs au modèle champ de phase à interface diffuse (énergie d'interface γ et largeur d'interface 2δ) sont identiques. En effet, comme rappelé dans la Section 4.1, l'expression de l'énergie d'interface \mathcal{F}_{int} n'est pas modifiée en considérant un modèle dans le CGNL. Le tableau 4.1 résume les différents paramètres pris en compte dans les simulations de cette section, que l'on soit dans le CGL ou le CGNL. L'adimensionnement est considéré de la même manière que dans le Chapitre 2 (voir Section 2.2.2).

Taille de la boîte de simulation (en nm)	$128 \times 128 \times 128$
Pas de grille d (en nm)	1
Pas de temps adimensionné \tilde{dt}	$1,6 \times 10^{-1}$
Largeur d'interface adimensionnée $2\tilde{\delta}$	6
Pré-facteur double-puits W (en J/m ³)	$1,6 \times 10^{10}$
Pré-facteur gradient α (en J/m)	$1,8 \times 10^{-8}$

TABLEAU 4.1 – Paramètres numériques utilisés dans les six simulations de la Section 4.2 (3 dans le CGL et 3 dans le CGNL). L'énergie d'interface γ est prise égale à 4 J/m² pour assurer l'obtention d'un profil proche d'une tangente hyperbolique.

Du point de vue des données élastiques, celles-ci sont rappelées dans le tableau 4.2 (données identiques à celles utilisées dans le Chapitre 2). On choisit de garder des constantes élastiques isotropes afin de se concentrer sur le seul effet du tenseur des déformations libres dans la simulation ($\underline{\underline{\varepsilon}}^*$ dans le CGL, $\underline{\underline{F}}^*$ dans le CGNL).

λ (en GPa)	63
μ (en GPa)	26
γ_{tw}	$\frac{\sqrt{2}}{4}$

TABLEAU 4.2 – Données élastiques : constantes élastiques et cisaillement associé au mode de maillage étudié.

4.2.3 Conditions aux limites

Dans l'ensemble des cas étudiés dans cette section, on considérera des conditions limites périodiques dans lesquelles les déformations moyennes sont imposées. Cela se traduit, dans le CGL, par l'application d'un tenseur de déformations $\underline{\underline{\varepsilon}}^{app}$ (c.-à-d. $\langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle = \underline{\underline{\varepsilon}}^{app}$), et dans le CGNL, par l'application d'un tenseur gradient de transformation $\underline{\underline{F}}^{app}$ (c.-à-d. $\langle \underline{\underline{F}} \rangle = \underline{\underline{F}}^{app}$). Lors de l'étude de la croissance d'un variant de macle sphérique de rayon $R_0 = 12$ nm dans le CGL (Chapitre 2, Section 2.4.4),

une forme et une amplitude minimale du tenseur de déformation à appliquer permettant la croissance de la macle avaient été identifiées (équation (2.73)). Pour rappel, dans le repère de base $\mathcal{B}_1 = \text{paren} * \tilde{\eta}_1^{(1)}, \tilde{K}_1^{(1)}, \tilde{P}_1^{(1)}$ du variant de macle (1), celui-ci s'écrivait :

$$\underline{\varepsilon}^{app} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma^{app} & 0 \\ \gamma^{app} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}_1}, \quad (4.7)$$

avec $\gamma^{app} = 7,75\%$.

Afin de garder l'aspect symétrique de la déformation appliquée dans le CGNL, on écrit le gradient de transformation appliqué suivant :

$$\underline{F}^{app} = \begin{pmatrix} 1 & \gamma^{app} & 0 \\ \gamma^{app} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}_1}. \quad (4.8)$$

En effet, si on considère que le tenseur de déformations appliquées $\underline{\varepsilon}^{app}$ dans le CGL s'exprime en fonction d'un gradient de transformation appliquée \underline{F}^{app} , la relation suivante est bien vérifiée si on prend en compte l'écriture de l'équation (4.8) :

$$\underline{\varepsilon}^{app} = \frac{1}{2} \left(\underline{F}^{appT} + \underline{F}^{app} - 2\mathbb{I} \right). \quad (4.9)$$

Pour rappel, l'équation (4.9) se base sur l'écriture du gradient de transformation \underline{F} et de l'expression linéarisée du tenseur de déformation $\underline{\varepsilon}$ en fonction du gradient de déplacement $\nabla \underline{u}$, qui s'écrivent :

$$\underline{F} = \mathbb{I} + \nabla \underline{u} \quad \text{et} \quad \underline{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\nabla \underline{u}^T + \nabla \underline{u}). \quad (4.10)$$

On note que la trace de $\underline{\varepsilon}^{app}$ est nulle et que le déterminant de \underline{F}^{app} vaut $1 - \gamma^{app2} = 0,994$, ce qui implique une variation de volume négligeable. Dans les calculs qui suivent, on considèrera alors respectivement dans le CGL et le CGNL les tenseurs $\underline{\varepsilon}^{app}$ et \underline{F}^{app} comme conditions limites périodiques en déformation. On suppose que l'amplitude de déformation $\gamma_{app} = 7,8\%$ sera suffisante pour la croissance de tous les germes initiaux considérés dans la Section 4.2.1.

4.2.4 Résultats et analyse

Les six configurations d'étude, basées sur les configurations initiales, inputs numériques et conditions aux limites présentés dans les Sections 4.2.1, 4.2.2 et 4.2.3 sont intégrées numériquement jusqu'à $\tilde{t} = 1440$ ($9000 \tilde{dt}$), permettant d'atteindre un état stationnaire.

La figure 4.2 représente l'évolution de la fraction volumique de macle $\langle \varphi \rangle$ en fonction du temps adimensionné pour les six simulations considérées. Cette figure rend bien compte de l'atteinte d'un équilibre pour une déformation appliquée donnée. En effet, on voit que la fraction volumique de macle $\langle \varphi \rangle$ n'évolue plus en fonction du temps au bout de 6000 pas de temps ($\tilde{t} = 960$), pour chacun des cas étudiés. On note également que, quelque soit le cadre étudié (CGL ou CGNL), et quelque soit la configuration initiale, la fraction volumique de macle finalement atteinte $\langle \varphi \rangle_{final}$ est extrêmement proche (petite variation pouvant être induite par la variation de volume), sauf dans le cas du germe

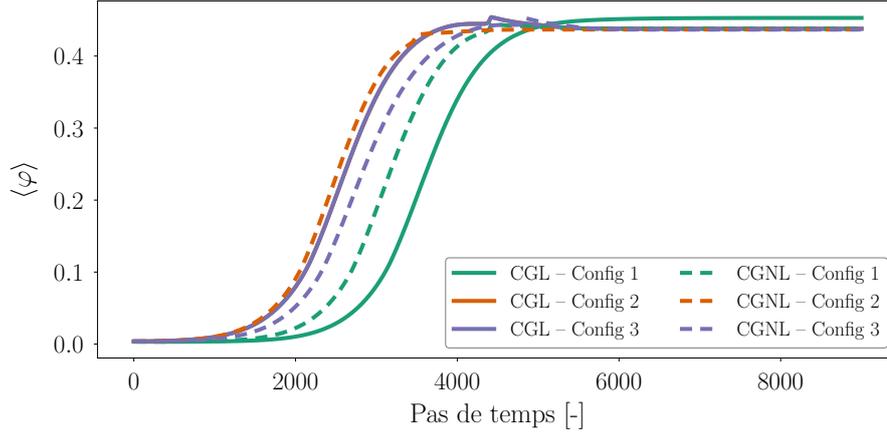


FIGURE 4.2 – Représentation graphique de l'évolution de $\langle \varphi \rangle$ en fonction du nombre de pas de calcul pour les six simulations considérées dans la Section 4.2. Les couleurs différencient les configurations initiales (vert : config. 1, orange : config. 2, violet : config. 3) et le style de trait différencie le CGL (trait plein) du CGNL (pointillés). Les traits pleins orange et violet sont superposés sur la figure.

sphérique initial dans le CGL. En effet, dans ce cas, la morphologie finale obtenue n'est pas lamellaire (voir figure 4.3, CGL) et présente des interfaces supplémentaires par rapport aux morphologies finales obtenues dans les autres cas étudiés, ce qui implique que la valeur moyenne du champ φ est supérieure en fin de simulation. Cependant, dans tous les cas, la valeur de fraction volumique finale peut être déduite du calcul du ratio $2\gamma^{app}/\gamma_{tw}$ au pour-cent près (voir figure 2.20). Ce ratio donne une valeur de $\langle \varphi \rangle_{final}$ de l'ordre de 44%, ce qui est en bon accord avec les résultats présentés sur la figure 4.2. On est alors capable d'anticiper la fraction volumique de macle finale en considérant un variant de macle (332) [113] dans le cas de conditions limites périodiques en déformations appliquées, que l'on soit dans le CGL ou dans le CNGL.

Un autre résultat intéressant visible sur cette figure est l'évolution identique de la fraction volumique dans les cas de la configuration initiale 2 et 3 dans le CGL (traits pleins, violet et orange se superposent). Ces deux configurations initiales ne varient que d'une rotation de $\pi/2$ par rapport à l'axe Z, ce résultat confirme ce qui avait été observé dans la Section 2.4.4 avec le comportement symétrique de l'énergie élastique le long des axes X et Y dans le CGL.

Cependant, lorsque l'on considère chacune des configurations initiales séparément, on note des différences de comportement de l'évolution de la fraction volumique en fonction du temps entre le CGL et le CNGL. Afin d'identifier l'origine de cette différence de comportement, on s'intéresse à l'évolution spatio-temporelle du champ $\varphi(\underline{x}, t)$ associé au variant de macle (332) [113]. Les figures 4.3, 4.4 et 4.5 rendent respectivement compte de cette évolution pour les trois configurations initiales 1, 2 et 3 considérées dans cette section. Sur chacune de ces figures, les colonnes (a), (b) et (c) correspondent respectivement à des configurations à $\tilde{t} = 160$, $\tilde{t} = 480$ et $\tilde{t} = 1440$ (temps final). La partie haute des figures correspond à l'évolution du champ dans le CGL, et la partie basse dans le CGNL. Enfin, dans chacun des cadres étudiés, la ligne du haut correspond à l'isosurface $\varphi = 0,5$ et la ligne du bas à la section de normale $\underline{P}^{(1)}$ du champ $\varphi(\underline{x}, t)$ passant par le centre de la boîte de simulation.

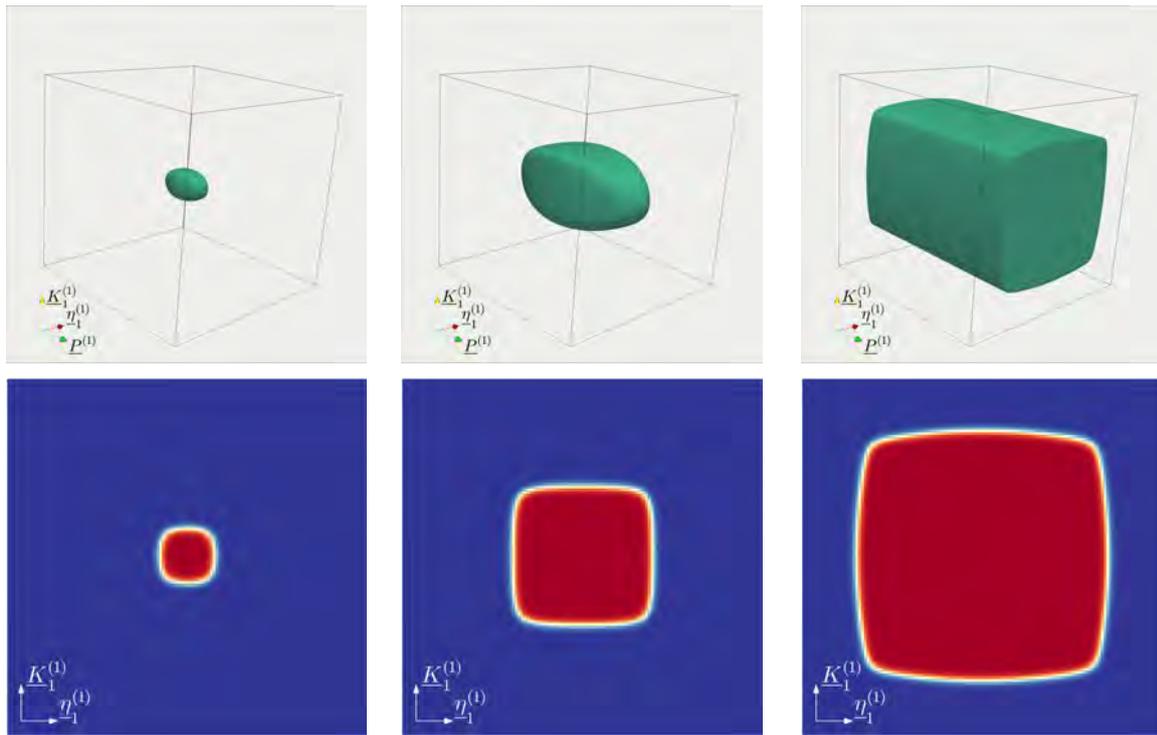
La [figure 4.3](#) représente le cas de l'évolution de la configuration initiale 1 du champ φ associé au variant de macle $(332) [11\bar{3}]$ étudié. Dans le CGL, on voit que le variant de macle croît en aiguille de section carrée, comme observé au préalable dans la [Section 2.4.1, figure 2.21](#). Ce type de croissance ne correspond pas aux observations expérimentales de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, où l'on voit plutôt des variants de macles sous forme de plaquettes (post-déformation). Dans le CGNL, la morphologie du variant de macle au cours de son évolution et en fin de simulation est très différente de ce qui est obtenu dans le CGL. En effet, on note que, dès le début de la simulation (colonne a), la sphère initiale évolue de manière à favoriser la présence d'une interface perpendiculaire à la direction direction $\underline{K}_1^{(1)}$ (axe Y). En cours d'évolution (colonne b), on note l'absence d'interface normale à la direction direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ (axe X), contrairement à ce que l'on peut voir dans le CGL. On obtient alors une morphologie plus "en biseau" au niveau des extrémités du variant de macle. Enfin, la morphologie finale (colonne c) est très différente de ce que l'on observe dans le CGL. En effet, malgré la fraction volumique finale $\langle \varphi \rangle_{final}$ extrêmement proche entre le CGL et le CGNL, on obtient finalement une lamelle de normale $\underline{K}_1^{(1)}$.

On s'intéresse à présent à la configuration initiale 2, où le germe de macle favorise la présence d'une interface de normale à $\underline{K}_1^{(1)}$. La [figure 2.4](#) montre que dans le cas de cette configuration, seule la morphologie du variant de macle en cours d'évolution diffère entre le CGL et le CGNL. En effet, on peut voir qu'à un état intermédiaire (colonne b), la principale différence réside dans le fait que l'interface de normale $\underline{\eta}_1^{(1)}$ est favorisée (CGL) ou non (CGNL). Quant aux configurations finales, elle sont très proches du point de vue de la morphologie et de la fraction volumique de macle pour les deux modèles.

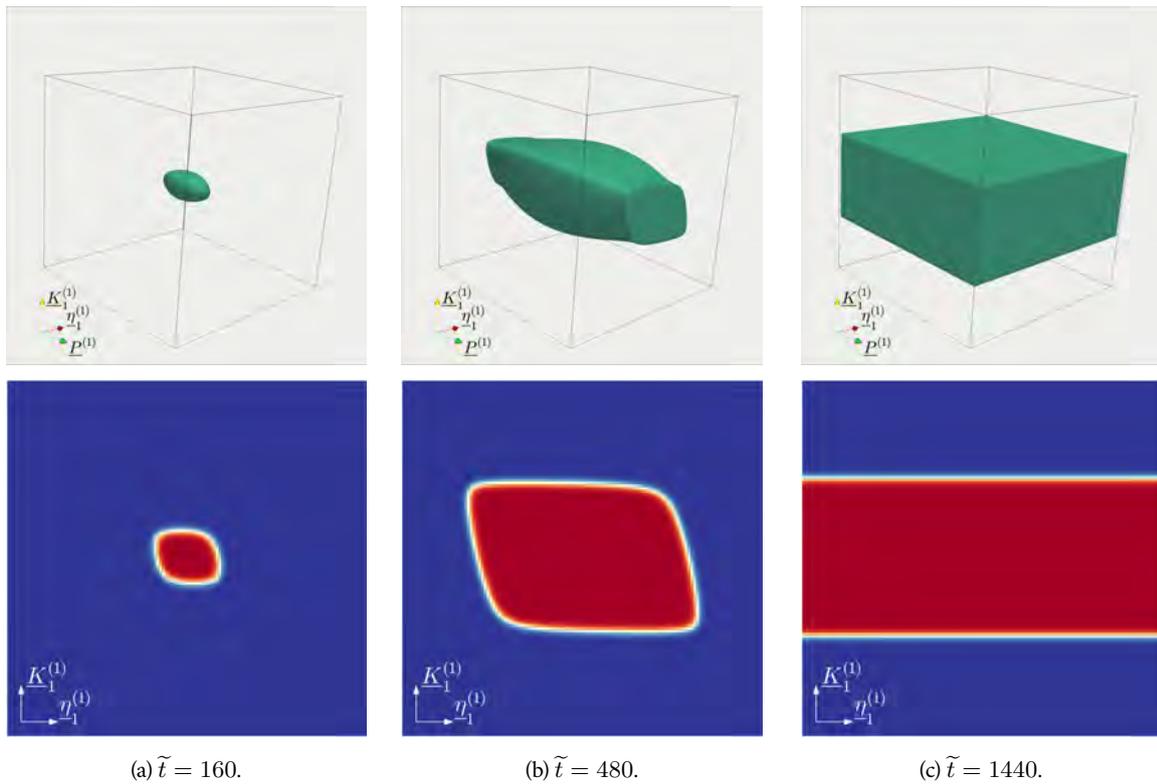
On s'intéresse enfin à la configuration initiale 3, où le germe initial favorise la présence d'une interface normale à $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Les résultats de l'évolution du champ de phase φ correspondant est présentée sur la [figure 4.5](#). Dans le CGL, on peut voir que la morphologie du variant de macle est identique au cas précédent, à une rotation de $\pi/2$ près selon l'axe Z : la morphologie finale obtenue est une lamelle de normale $\underline{\eta}_1^{(1)}$. Ce comportement avait déjà été observé dans les cas 2D étudiés dans la [Section 2.4.4](#) (voir figures [2.27](#) et [2.28](#)). On peut dès lors comprendre la superposition parfaite de la courbe d'évolution de la fraction volumique $\langle \varphi \rangle$ dans le CGL pour les configurations initiales 2 et 3 (voir [figure 4.2](#)). Par contre, dans le CGNL, on peut voir que le germe évolue de manière à finalement atteindre la forme d'une lamelle de normale $\underline{K}_1^{(1)}$. Ainsi, dans le CGNL, la morphologie finale atteinte est identique quelque soit la configuration initiale choisie parmi celles présentées dans cette section (1, 2 ou 3).

Cette étude a ainsi permis de montrer l'apport de la prise en compte d'une énergie élastique formulée dans le CGNL pour des niveaux de déformation élevés. En effet, on a pu voir que dans le cas du CGL, la morphologie du variant de macle $(332) [11\bar{3}]$ en cours de croissance et en fin de simulation dépendait fortement de la configuration initiale choisie. Or, dans le cas du CGNL, quelque soit la configuration initiale choisie par les configurations 1, 2 ou 3, la morphologie finale de la lamelle reste la même : une plaquette de normale $\underline{K}_1^{(1)}$, conforme aux observations expérimentales.

Configuration 1 – évolution dans le CGL



Configuration 1 – évolution dans le CNGL



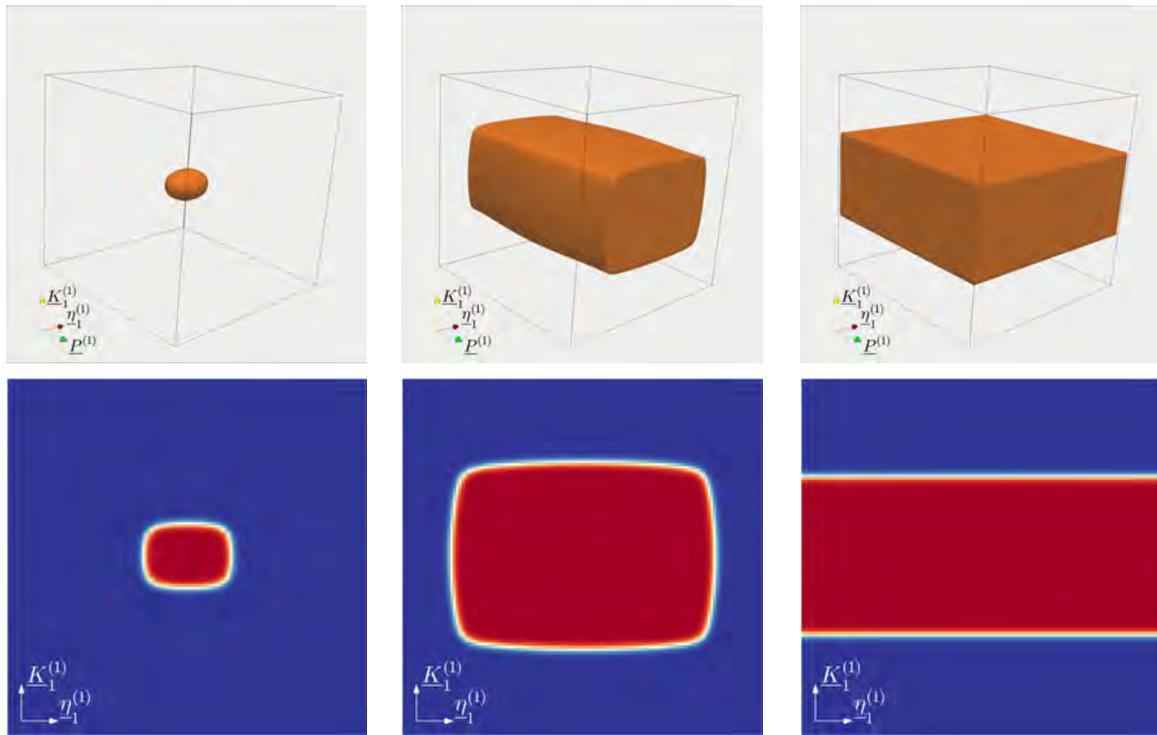
(a) $\tilde{t} = 160.$

(b) $\tilde{t} = 480.$

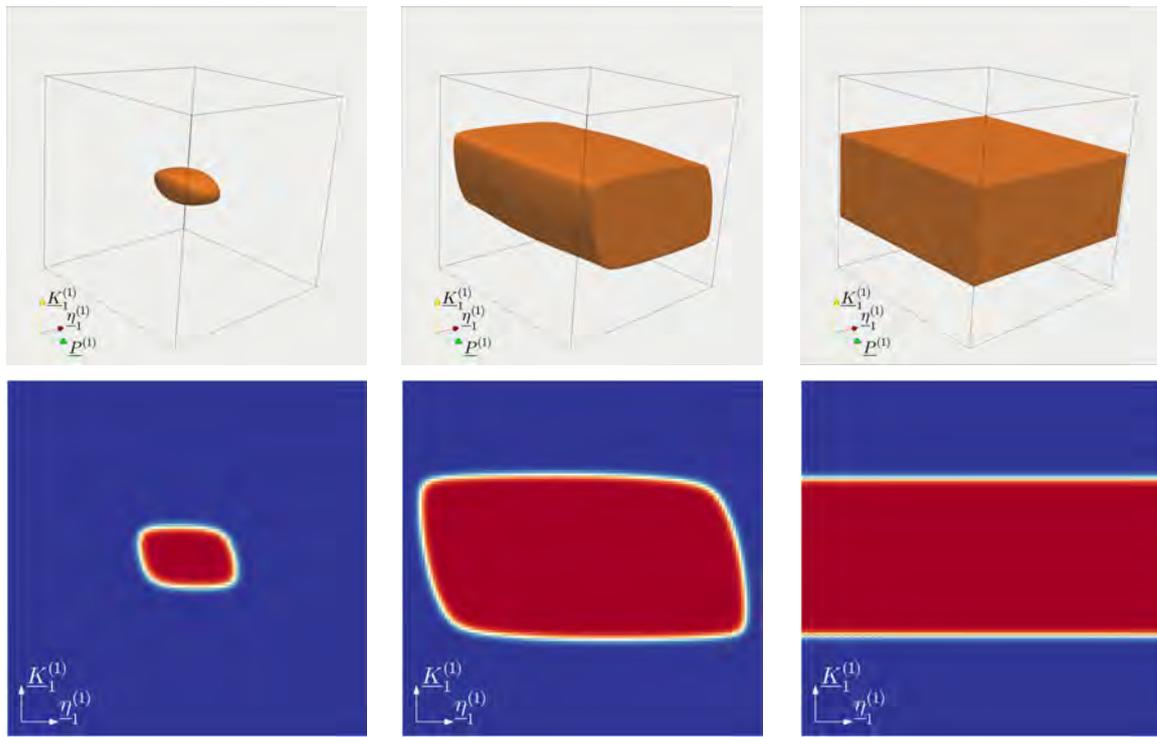
(c) $\tilde{t} = 1440.$

FIGURE 4.3 – Évolution du champ φ dans le cas de la configuration initiale 1 présentée sur la figure 4.1a, dans le CGL (partie du haut) et dans le CNGL (partie du bas). Dans chacune des parties de la figure, la ligne du haut représente l'isosurface $\varphi = 0,5$ en 3D, et la ligne du bas correspond à une section $\underline{P}^{(1)}$ du champ φ passant par le centre de la boîte de simulation.

Configuration 2 – évolution dans le CGL



Configuration 2 – évolution dans le CGNL



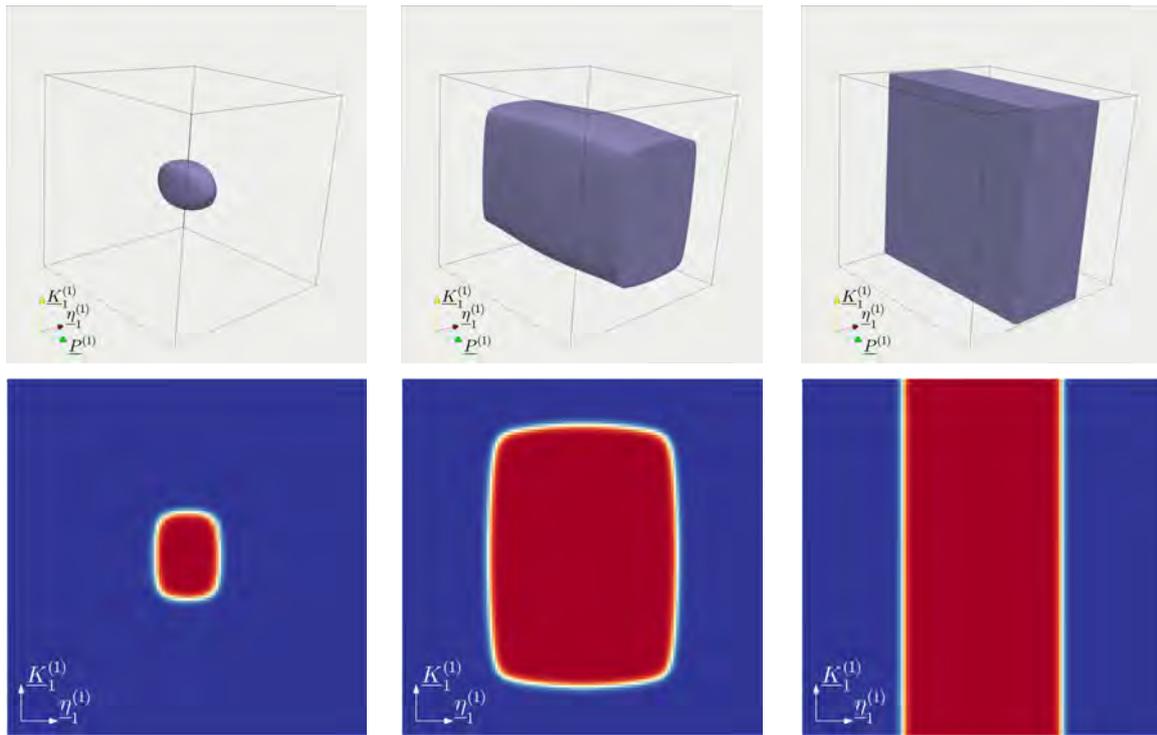
(a) $\tilde{t} = 160$.

(b) $\tilde{t} = 480$.

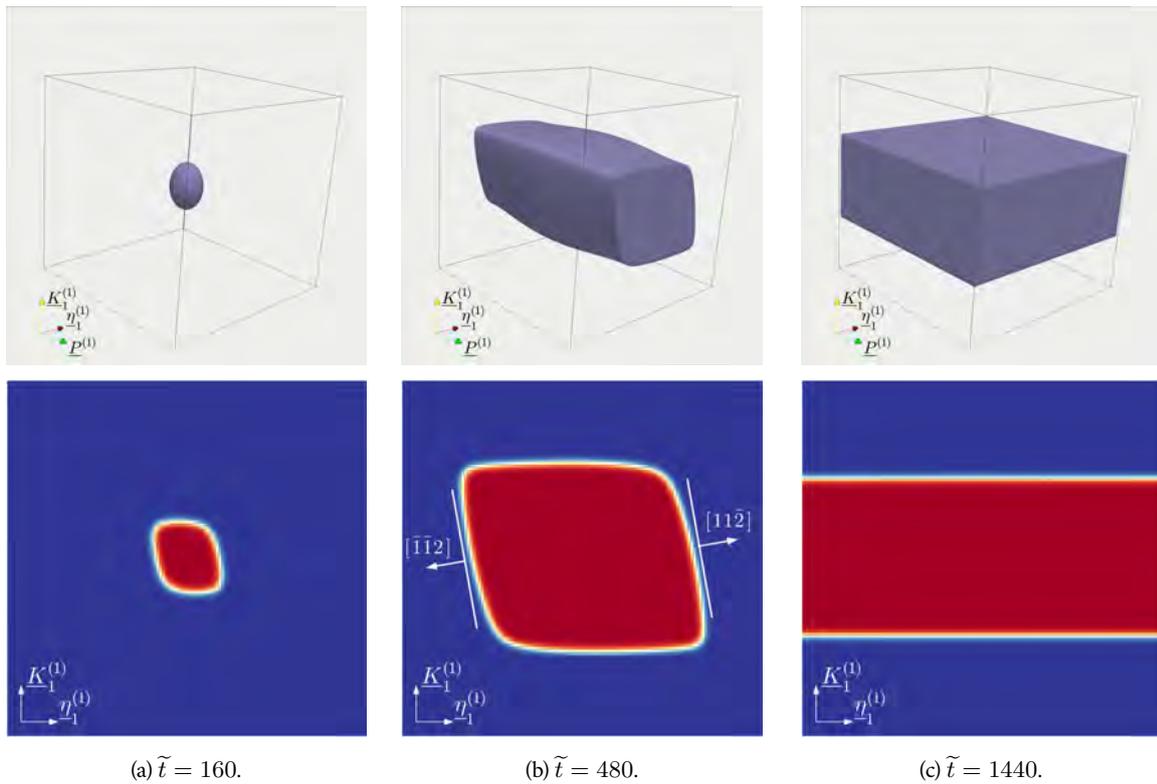
(c) $\tilde{t} = 1440$.

FIGURE 4.4 – Évolution du champ φ dans le cas de la configuration initiale 2 présentée sur la figure 4.1a, dans le CGL (partie du haut) et dans le CNGL (partie du bas). Dans chacune des parties de la figure, la ligne du haut représente l'isosurface $\varphi = 0,5$ en 3D, et la ligne du bas correspond à une section $\underline{P}^{(1)}$ du champ φ passant par le centre de la boîte de simulation.

Configuration 3 – évolution dans le CGL



Configuration 3 – évolution dans le CNGL



(a) $\tilde{t} = 160$.

(b) $\tilde{t} = 480$.

(c) $\tilde{t} = 1440$.

FIGURE 4.5 – Évolution du champ φ dans le cas de la configuration initiale 3 présentée sur la figure 4.1a, dans le CGL (partie du haut) et dans le CNGL (partie du bas). Dans chacune des parties de la figure, la ligne du haut représente l'isosurface $\varphi = 0,5$ en 3D, et la ligne du bas correspond à une section $\underline{P}^{(1)}$ du champ φ passant par le centre de la boîte de simulation.

Pour mieux comprendre ce résultat, nous avons tracé l'énergie élastique dans le CGNL d'un système biphasé composé d'une lamelle (correspondant à un variant de macle) au sein d'une matrice, en fonction de l'orientation de sa normale \underline{n} . Ce travail a été réalisé dans le CGL dans la [Section 2.4.4](#). On avait alors pu montrer que le rôle de l'anisotropie de l'énergie élastique (induite ici seulement par la présence d'un tenseur de déformation libre) est déterminant dans le cas étudié, où seule l'énergie élastique entre en compétition avec l'énergie d'interface. Dans le cas de contraintes appliquées nulles, on avait alors pu voir que les minima de l'énergie élastique étaient atteints pour des lamelles de normales $\underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_1^{(1)}$, et que ceux-ci correspondaient à des valeurs nulles de l'énergie élastique (plans d'habitat, voir [figure 2.26](#)).

Afin de reproduire cette étude dans le CGNL, on se base sur le travail réalisé dans les [Sections 3.3.1.1](#) et [3.3.1.3](#) du [Chapitre 3](#), où l'on cherchait à construire une solution de référence pour différents champs mécaniques (impliquant la résolution de l'équilibre mécanique dans le CGNL) dans le cas d'un système biphasé identique, mais pour une orientation de lamelle \underline{n} donnée. Un travail a été réalisé afin d'étendre les possibilités de cet outil pour qu'il puisse être capable de résoudre l'équilibre mécanique pour différentes orientations de lamelle. Ainsi, cet outil permet de représenter l'énergie élastique dans le système matrice-lamelle en fonction de l'orientation de la lamelle \underline{n} dans le CGNL. De plus, la possibilité de prendre en compte des conditions aux limites périodiques en contraintes appliquées a été ajoutée, en se basant sur le travail réalisé dans la mise en place du solveur mécanique dans le CGNL (voir [Section 3.2.1](#)).

Dans un premier temps, on cherche à représenter l'énergie élastique $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ du-dit système biphasé dans le cas de contraintes appliquées nulles. Le tenseur de déformation libre associé au variant de macle (332) $[11\bar{3}]$ est introduit dans la lamelle. La fraction volumique de la lamelle est de 44%, valeur correspondant aux résultats des simulations champ de phase précédentes, et les constantes élastiques sont prises identiques aux simulations (voir [tableau 4.2](#)). On se limite à la coupe de $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)} = [1\bar{1}0]$, où les différences de morphologie obtenues entre CGL et CGNL lors de la croissance du variant de macle (332) $[11\bar{3}]$ étaient les plus marquantes ([figures 4.3](#), [4.4](#) et [4.5](#)). La précision sur l'orientation de la lamelle (macle) est de l'ordre de 10^{-4} rad (40000 points pour 2π). Cette coupe est représentée dans le CGL sur la [figure 4.6a](#) (aussi visible dans la [Section 2.4.4](#)) et dans le CGNL sur la [figure 4.6b](#).

Dans le CGL, on retrouve les mêmes résultats que ceux présentés sur la [figure 2.26](#) : deux minima globaux (et leurs opposés) nuls correspondant à des lamelles de normale $\underline{n} = \underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{n} = \underline{K}_1^{(1)}$, respectivement à 0° et 90° de la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$. Or, dans le CGNL, on voit que le minimum global associé à la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$, présent dans le CGL, est absent. En revanche, on voit apparaître un minimum global pour une direction située à 10° de la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$ dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$. Cristallographiquement parlant, la direction qui se trouve à 10° de la direction $\underline{\eta}_1^{(1)} = [11\bar{3}]$ dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$ correspond à la direction $\underline{K}_2^{(1)} = [11\bar{2}]$. Ainsi, une énergie élastique résiduelle nulle est obtenue dans le cas d'une lamelle de normale $\underline{n} = \underline{K}_1^{(1)}$ ou $\underline{n} = \underline{K}_2^{(1)}$.

Contrairement à ce qui est observé dans le CGL, ce dernier résultat est conforme aux résultats de l'équation de maclage (*twinning equation*) présentés dans la [Section 1.3.1](#). En effet, nous avons vu que, dans le cas où l'on considère une théorie élastique exacte (non linéarisée), deux interfaces macle-matrice per-

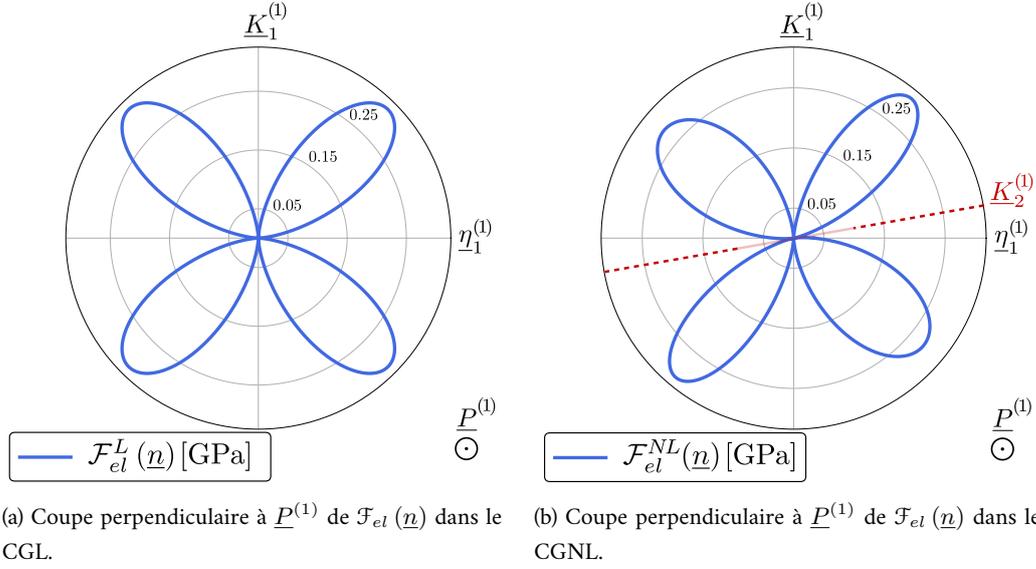


FIGURE 4.6 – Représentation polaire de l'énergie élastique $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ d'un système biphasé composé d'une macle de morphologie lamellaire de normale \underline{n} , avec constantes élastiques isotropes et homogènes. Conditions aux limites périodiques : contrainte appliquée nulle. (a) Dans le cadre géométriquement linéaire (CGL). (b) Dans le cadre géométriquement non-linéaire (CGNL). L'exposant "L" ou "NL" au dessus de \mathcal{F}_{el} correspond au CGL ou au CGNL. Les valeurs numériques des minima sont données dans le [tableau 4.3](#).

mettent d'accommoder parfaitement la déformation de cisaillement associée au système de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$: une interface normale à $\underline{K}_1^{(1)}$, correspondant au plan de maillage, et une interface normale à $\underline{K}_2^{(1)}$, correspondant au plan de maillage réciproque (ou conjugué).

Dès lors, on s'interroge sur le choix du système à favoriser la présence de l'interface de normale $\underline{K}_1^{(1)}$ au détriment de l'interface de normale $\underline{K}_2^{(1)}$ dans le cas de la croissance du variant de macle $\{332\} [11\bar{3}]$ dans le CGNL (figures 4.3, 4.4 et 4.5). On s'intéresse alors à une représentation de l'énergie élastique similaire à celle de la figure [figure 4.6](#), en considérant cette fois les conditions aux limites en déformation appliquée des simulations champ de phase précédentes (voir [Section 4.2.3](#)). Dans ce cas, la coupe de $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)} = [1\bar{1}0]$ est représentée sur la [figure 4.7b](#). On s'intéresse également au résultat obtenu dans le CGL sur la figure [figure 4.7a](#). Les valeurs numériques des minima de l'énergie élastique dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$ sont données dans le [tableau 4.3](#).

On note alors que, dans le CGL, les minima de l'énergie élastique sont identiques et correspondent aux orientations $\underline{n} = \underline{\eta}_1^{(1)}$ et $\underline{n} = \underline{K}_1^{(1)}$. Le système cherche alors à favoriser la présence de ces deux interfaces dans le système, comme on peut le voir sur les résultats des simulations champ de phase (figures 4.3, 4.4 et 4.5, partie CGL).

Cependant, dans le CGNL, lorsque l'on considère une déformation appliquée correspondant à celle utilisée dans les simulations champ de phase, le système bi-phasé précédemment décrit minimise son énergie élastique dans deux cas : (i) un minimum global, en considérant une lamelle de normale $\underline{n} = \underline{K}_1^{(1)}$ et (ii) un minimum local, en considérant une lamelle de normale $\underline{n} = \underline{K}_2^{(1)}$.

Cadre	Minimum	Angle $\widehat{(\underline{n}, \underline{\eta}_1^{(1)})}$	Dir. cristallog.	Valeur de \mathcal{F}_{el} [GPa]
CGL	n°1	$0^\circ \pm 180^\circ$	$\underline{n} = \underline{\eta}_1^{(1)}$	$3,30 \times 10^{-6}$
CGL	n°2	$90^\circ \pm 180^\circ$	$\underline{n} = \underline{K}_1^{(1)}$	$3,30 \times 10^{-6}$
CGNL	n°1	$10^\circ \pm 180^\circ$	$\underline{n} = \underline{K}_2^{(1)}$	$2,44 \times 10^{-2}$
CGNL	n°2	$90^\circ \pm 180^\circ$	$\underline{n} = \underline{K}_1^{(1)}$	$3,95 \times 10^{-3}$

TABLEAU 4.3 – Valeurs des minima de l'énergie d'élastique représentée sur la figure 4.7 dans le plan de normale $\underline{P}^{(1)}$, avec angle entre la direction \underline{n} associée et la direction $\underline{\eta}_1^{(1)}$, dans le CGL et dans le CGNL. Conditions aux limites périodiques en déformation appliquée correspondant aux simulations champ de phase (voir Section 4.2.3).

Comme observé dans les résultats des simulations champ de phase (figures 4.3, 4.4 et 4.5, partie CGNL), le système cherche alors à favoriser la présence d'interfaces de normale $\underline{K}_1^{(1)}$. On retrouve les interfaces normales à $\underline{K}_2^{(1)}$ en cours de croissance (voir figure 4.4b dans le CGNL), créant un biseau avec les interfaces de normale $\underline{K}_1^{(1)}$. Ainsi, lors de la croissance d'une macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans la matrice, une interface de normale $\underline{K}_2^{(1)}$ pourrait être observée en pointe macle, dans une section de normale $\underline{P}^{(1)}$. Cependant, nous n'avons pas de données expérimentales permettant de confirmer cette hypothèse : il est compliqué d'observer l'extrémité de variants de macle au sein d'un grain, ceux-ci traversant très vite le grain en question.

L'outil ainsi développé permet, à l'aide d'une représentation de l'énergie élastique du système biphasé étudié, d'anticiper les orientations des interfaces macle-matrice favorisées, que l'on soit dans le CGL ou dans le CGNL.

Afin de s'assurer du rôle prépondérant du tenseur de déformation libre dans l'obtention d'une énergie élastique anisotrope (et donc d'interfaces macle-matrice spécifiques dans le système étudié), on réalise le même calcul que précédemment dans le CGNL, en considérant cette fois des constantes élastiques cubiques (anisotropes). Celles-ci sont basées sur les travaux de Tane *et al.* [2008] sur l'alliage Ti-25Nb-Ta-Zr, et de Nejezchlebová *et al.* [2019] sur l'alliage Ti-15Mo. Pour ces deux alliages β -Ti, le ratio d'anisotropie est de 2,05. Les constantes élastiques relatives à ces deux alliages sont indiquées dans le tableau 4.4, ainsi que celles correspondant au modèle isotrope (basées sur les données du tableau 4.2).

La prise en compte de constantes élastiques anisotropes implique la nécessité d'exprimer les constantes élastiques dans le variant de macle lamellaire $\underline{\lambda}^{(1)}$ en fonction des constantes élastiques de la matrice $\underline{\lambda}^{(m)}$ à l'aide de la relation :

$$\underline{\lambda}^{(1)} = \underline{Q}^{(1)T} \cdot \left(\underline{Q}^{(1)T} \cdot \underline{\lambda}^{(m)} \cdot \underline{Q}^{(1)} \right) \cdot \underline{Q}^{(1)}, \quad (4.11)$$

où $\underline{Q}^{(1)}$ est la matrice de réorientation du réseau relative au variant de macle $(332) [11\bar{3}]$ (voir Annexe B).

La figure 4.8 montre une comparaison, pour les différents jeux de constantes élastiques du tableau 4.4, de coupes normales à $\underline{P}^{(1)}$ des tracés de l'énergie élastique dans le CGNL en fonction de

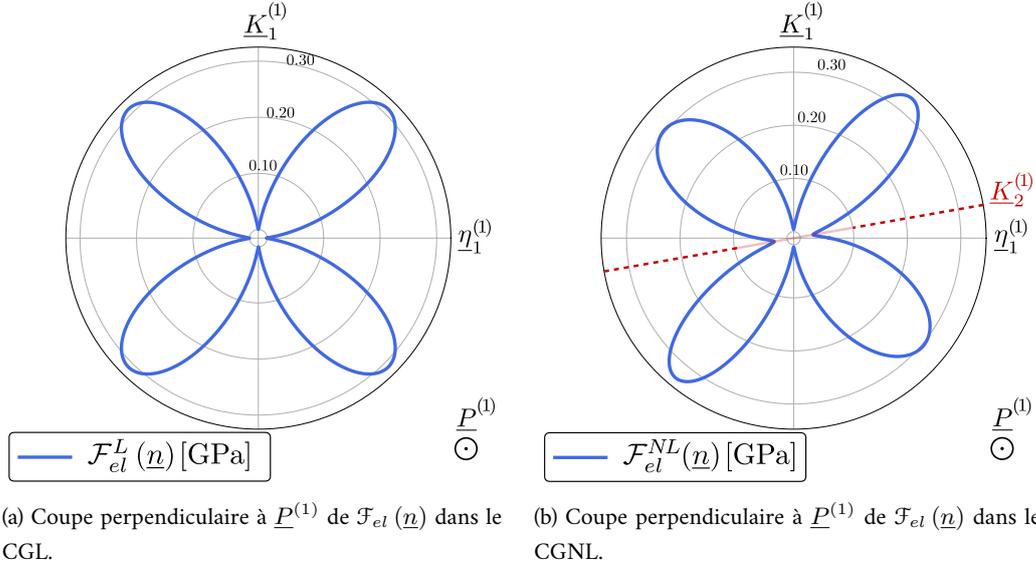


FIGURE 4.7 – Représentation polaire de l'énergie élastique $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ d'un système biphasé composé d'une macle de morphologie lamellaire de normale \underline{n} , avec constantes élastiques isotropes et homogènes. Conditions aux limites périodiques : déformation appliquée correspondant à celle utilisée dans les simulations champ de phase. (a) Dans le cadre géométriquement linéaire (CGL). (b) Dans le cadre géométriquement non-linéaire (CGNL). L'exposant "L" ou "NL" au dessus de \mathcal{F}_{el} correspond au CGL ou au CGNL. Les valeurs numériques des minima sont données dans le [tableau 4.3](#).

l'orientation \underline{n} d'une macle lamellaire portant le tenseur de déformation libre du variant (332) $[11\bar{3}]$. Le cas des constantes élastiques isotropes est représenté en bleu, et les cas anisotropes en rouge. À noter que le cas des constantes élastiques isotropes induit une homogénéité des constantes élastiques dans le système, c.-à-d. $\lambda_{\approx}^{(m)} = \lambda_{\approx}^{(1)}$.

Dans les trois cas étudiés, on voit que les minima de l'énergie élastique correspondent à des orientations de lamelle extrêmement proches de celles obtenues dans le cas isotrope ([tableau 4.3](#)), au centième de degré près. Dans le cas de l'alliage n°2, on note des valeurs plus élevées des maxima de l'énergie élastique en comparaison aux deux autres tracés, induites par les valeurs élevées des constantes élastiques. On note également des différences au niveau de la morphologie des lobes observés sur la représentation entre cas isotrope (en bleu) et cas anisotropes (en rouge), mais aussi au niveau des orientations des maxima de l'énergie élastique (de l'ordre de 3° pour le maximum global). Comme le système cherche à minimiser la présence d'interface de normale correspondant aux maxima de l'énergie élastique, cette différence peut jouer sur l'émoussement des "coins" joignant les interfaces de normales $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_2^{(1)}$. Deux simulations champ de phase sont réalisées en prenant en compte le jeu de constantes élastiques isotropes et celles correspondant à l'alliage n°1. Les axes de la boîte de simulation correspondent ici aux axes cubiques $X = [100]$, $Y = [010]$ et $Z = [001]$. Sur la [figure 4.9](#), on représente le contour $\varphi = 0,5$ dans une section de normale $\underline{P}^{(1)}$ d'un variant de macle qui croît dans la matrice : en bleu, dans le cas isotrope, et en rouge, dans le cas des constantes élastiques anisotropes de l'alliage n°1. Cette superposition de contours est réalisée pour des fractions volumiques proches (différence de 2% entre les deux simulations à cet instant) et en début de simulation, afin d'observer les interfaces normales à la direction $\underline{K}_2^{(1)}$. Conformément aux résultats obtenus précédemment, les orientations des interfaces

Alliage	Composition	C_{11} [GPa]	C_{12} [GPa]	C_{44} [GPa]	Ratio aniso.
n°1	Ti-25Nb-Ta-Zr	90,8	55,9	35,8	2,05
n°2	Ti-15Mo	139,4	95,7	44,7	2,05
n°3	Modèle isotrope	115	63	26	1

TABLEAU 4.4 – Lignes 1 et 2 : constantes élastiques anisotropes d’alliages β -titane présentant du maillage mécanique $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ à température ambiante. Ligne 3 : constantes élastiques isotropes utilisées (voir tableau 4.2).

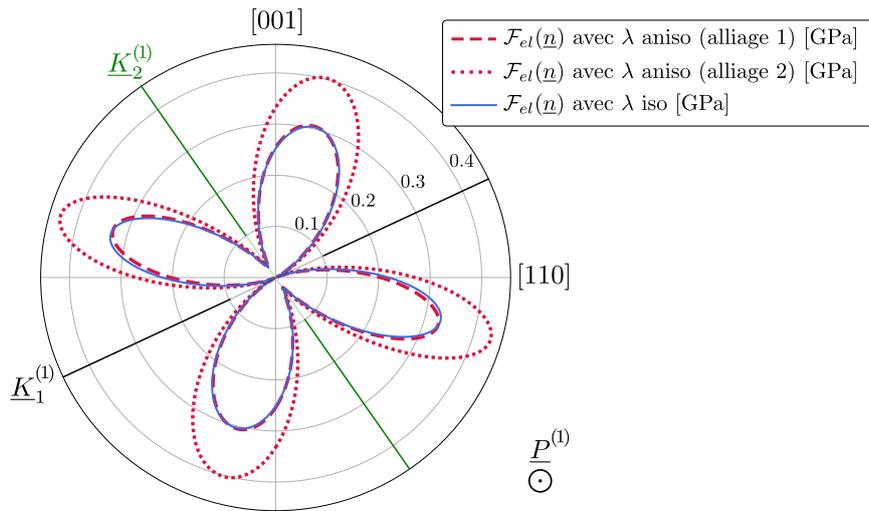


FIGURE 4.8 – Représentation polaire de l’énergie élastique $\mathcal{F}_{el}(\underline{n})$ dans le CGNL d’un système biphasé composé de la matrice c.c initiale et d’une macle lamellaire d’orientation \underline{n} , portant le tenseur de déformation libre du variant de macle $(332) [11\bar{3}]$. En bleu : constantes élastiques isotropes, en rouge : constantes élastiques inhomogènes (matrice-macle) et anisotropes.

macles-matrice favorisées correspondent aux minima de l’énergie élastique observés sur la figure 4.8, avec une légère modification de la morphologie au niveau jonctions entre les interfaces normales à $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_2^{(1)}$. On remarque une légère désorientation de l’interface normale à $\underline{K}_1^{(1)}$ dans le cas anisotrope (contour rouge). Il s’agit là d’un effet des conditions aux limites périodiques, dont les effets sont discutés dans la Section 4.3.3.

Ainsi, de manière globale, l’anisotropie des constantes élastiques n’a pas affecté la croissance anisotrope sous forme de lamelle favorisant les interfaces normales à $\underline{K}_1^{(1)}$ et $\underline{K}_2^{(1)}$ mais seulement la morphologie des extrémités de la macle. Les résultats obtenus dans le cas de constantes élastiques anisotropes justifient le fait de considérer des constantes élastiques isotropes dans la suite de ce travail. En effet, si on s’intéresse à la morphologie globale de la macle, le rôle du tenseur de déformation libre sur l’anisotropie de l’énergie élastique est prépondérant face à celui de l’anisotropie des constantes élastiques.

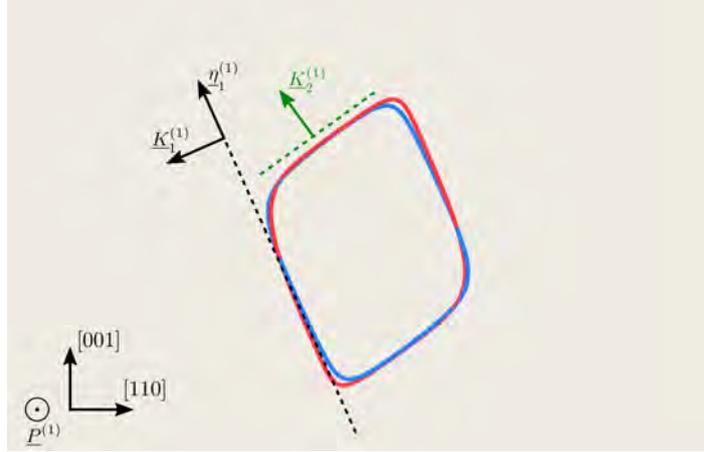


FIGURE 4.9 – Représentation du contour $\varphi = 0,5$ dans une section de normale $\underline{P}^{(1)}$ de la boîte de simulation : en bleu, constantes élastiques isotropes, en rouge, constantes élastiques de l’alliage n°1 du [tableau 4.4](#).

4.3 Développement d’un modèle champ de phase multi-variants

Dans cette section, on s’intéresse à l’étude de l’interaction de plusieurs variants de macles au sein d’une microstructure d’alliage de titane β -métastable déformée. Pour cela, il est nécessaire d’étendre le modèle Allen-Cahn avec élasticité, jusqu’ici formulé pour un seul variant de macle, à un nombre fini de variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ en présence dans la matrice. On se base sur les travaux de [Clayton et Knap \[2011a\]](#), [Heo et al. \[2014\]](#), ou encore [Gu et al. \[2013\]](#) pour l’écriture de ce modèle, où le chevauchement des champs de phase sont pénalisés par un terme supplémentaire dans l’énergie chimique (détaillée dans la section suivante). À noter que les modèles cités n’ont pas été appliqués dans le cas d’une élasticité dans le CGNL, avec prise en compte de plusieurs variants de macle et une résolution de l’équilibre mécanique par méthode spectrale.

Dans cette partie, nous ne considérons que des variants de macle primaire, les situations avec une hiérarchie de macles seront discutées dans le [Chapitre 5](#).

4.3.1 Mise en place du modèle multi-variants

Afin de considérer un nombre de variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ supérieur à 1 dans un modèle champ de phase, le choix le plus simple est de considérer un modèle de type Allen-Cahn multi-variants où l’on associe un champ de phase $\varphi^{(i)}(\underline{x}, t)$ à chaque variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, noté i . Afin d’éviter le recouvrement des champs $\varphi^{(i)}$, il est nécessaire de considérer un terme énergétique pénalisant ce phénomène dans la formulation du modèle. Le modèle se base alors sur la somme des termes énergétiques associés à chacun des champs $\varphi^{(i)}$. Dans le cas où l’on considère N variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, le potentiel lié à l’énergie d’interface \mathcal{F}_{int} s’écrit :

$$\mathcal{F}_{int} = \int_{\Omega} \sum_{i=1}^N \left[Wg(\varphi^{(i)}) + \frac{\alpha}{2} |\nabla \varphi^{(i)}|^2 + A_{\gamma} \sum_{j=i+1}^N (\varphi^{(i)})^2 (\varphi^{(j)})^2 \right] dV, \quad (4.12)$$

où W est l’échelle de densité d’énergie chimique, α le coefficient du terme de gradient, et A_{γ} le préfacteur du terme pénalisant le recouvrement des champs $\varphi^{(i)}$. Ce coefficient de pénalisation est choisi

suffisamment grand, de manière à ce que $\max \sum_{i=1}^N \varphi^{(i)} \leq 1$ dans l'ensemble de la boîte de simulation (condition vérifiée dans l'ensemble des calculs multi-variants effectués). Dans les cas étudiés, on considèrera $A_\gamma = 3W$. Les paramètres W et α sont choisis identiques à ceux présentés dans le [tableau 4.1](#). L'énergie élastique s'exprime de la même façon que dans l'équation (4.3) dans le CGNL et de la même façon que dans l'équation (2.60) dans le CGL. Cependant, les expressions des tenseurs de déformation libre $\underline{\xi}^*$ dans le CGL et \underline{F}^* dans le CGNL ainsi que l'expression du tenseur d'élasticité dans le cas anisotrope sont modifiées. On écrit alors :

$$\underline{F}^* = \mathbb{I} + \sum_{i=1}^N h(\varphi^{(i)}) \nabla \underline{u}^{0(i)} \quad \text{avec} \quad \nabla \underline{u}^{0(i)} = \gamma_{tw} \left(\tilde{\underline{\eta}}_1^{(i)} \otimes \tilde{\underline{K}}_1^{(i)} \right), \quad (4.13)$$

$$\underline{\xi}^* = \sum_{i=1}^N h(\varphi^{(i)}) \underline{\xi}^{0(i)} \quad \text{avec} \quad \underline{\xi}^{0(i)} = \frac{\gamma_{tw}}{2} \left(\tilde{\underline{\eta}}_1^{(i)} \otimes \tilde{\underline{K}}_1^{(i)} + \tilde{\underline{K}}_1^{(i)} \otimes \tilde{\underline{\eta}}_1^{(i)} \right), \quad (4.14)$$

$$\underline{\lambda} = \sum_{i=1}^N h(\varphi^{(i)}) \underline{\lambda}^{(i)} + \left[1 - \sum_{i=1}^N h(\varphi^{(i)}) \right] \underline{\lambda}^{(m)}, \quad (4.15)$$

où $\tilde{\underline{\eta}}_1^{(i)}$, $\tilde{\underline{K}}_1^{(i)}$ et $\underline{\lambda}^{(i)}$ sont définis pour chacun des variants de macle (i) du système de maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ introduit dans le système étudié. La matrice n'est alors pas associée à un champ de phase bien défini, mais correspond à l'état où l'ensemble des champs $\varphi^{(i)}$ est nul.

Dès lors, on peut s'intéresser à la capacité du modèle à faire croître un nombre fini de variant au sein du même système. Pour cela, la loi d'évolution cinétique TDGL (équation (2.39)) est appliquée pour chacun des champs non-conservés $\varphi^{(i)}$:

$$\frac{\partial \varphi^{(i)}}{\partial t} = -L \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi^{(i)}} \quad \text{avec} \quad \mathcal{F} = \mathcal{F}_{int} + \mathcal{F}_{el}. \quad (4.16)$$

Le terme de pénalisation du recouvrement des champs de phase ajouté dans l'équation (4.12) apparaît alors dans la force motrice d'origine chimique. Cette dernière s'écrit de la façon suivante :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{int}}{\delta \varphi^{(i)}} = W g'(\varphi^{(i)}) - \alpha \Delta \varphi^{(i)} + 2A_\gamma \varphi^{(i)} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \left(\varphi^{(j)} \right)^2. \quad (4.17)$$

Avant de tester la capacité du modèle à décrire la croissance de plusieurs variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, on analyse le chargement à appliquer afin de permettre la croissance simultanée de deux variants de macle.

4.3.2 Chargement appliqué pour la croissance de deux variants de macle

Dans un premier temps, on considère une application du modèle multi-variants développé dans la section précédente au cas de la croissance de deux variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. À la manière du travail réalisé dans la [Section 2.4](#), on cherche à déterminer un cas de chargement simple, du type traction uniaxiale, permettant de faire croître deux variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$.

Dans la [Section 2.4](#), nous avons déterminé l'amplitude et l'axe de traction permettant de faire croître

un germe de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ sphérique de rayon initial $R_0 = 12$ nm. En se basant sur des travaux expérimentaux (Min *et al.* [2013], Zhou *et al.* [2017]) et théoriques (Lebensohn et Tomé [1993], Lee et Yoo [1990]), l'axe de traction \underline{t} avait été choisi de manière à maximiser le facteur de Schmid (SF) dans nos calculs. Le SF est calculé en fonction de l'axe de traction \underline{t} , de la direction de cisaillement (normalisée) $\tilde{\eta}_1^{(i)}$ et de la direction normale au plan de maclage (normalisée) $\tilde{K}_1^{(i)}$ pour chaque variant de macle i à l'aide de la formule suivante :

$$SF^{(i)} = \left(\underline{t} \cdot \tilde{\eta}_1^{(i)} \right) \left(\underline{t} \cdot \tilde{K}_1^{(i)} \right). \quad (4.18)$$

L'amplitude de traction σ^0 avait également été déduite pour l'ensemble des paramètres considérés dans ce cas d'étude (morphologie du germe initial, énergie d'interface, données élastiques), et était de l'ordre de 8 GPa (voir Section 2.4.1). En considérant les valeurs $\sigma^0 = 8$ GPa et $SF_{max} = 0,5$, on peut alors calculer une contrainte de cisaillement projetée minimale σ^c permettant d'obtenir la croissance d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$:

$$\sigma^c = \sigma^0 \times SF_{max} = 4 \text{ GPa}. \quad (4.19)$$

Ainsi, pour chaque variant i de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ et pour un axe de traction \underline{t} donné, on peut calculer $SF^{(i)}$ à l'aide de l'équation (4.18), puis la valeur de la contrainte à appliquer $\sigma^{0(i)}$ permettant la croissance du variant i :

$$\sigma^{0(i)} = \frac{\sigma^c}{SF^{(i)}}. \quad (4.20)$$

Dès lors, si l'on souhaite que deux germes de macle sphériques associés à deux variants i et j différents croissent pour un axe de traction \underline{t} donné, il suffit de calculer les amplitudes de contrainte $\sigma^{0(i)}$ et $\sigma^{0(j)}$. Finalement, il suffira de considérer un chargement appliqué de type traction uniaxiale d'axe \underline{t} et d'amplitude de traction $\sigma^0 = \max(\sigma^{0(i)}, \sigma^{0(j)})$ afin d'observer la croissance des deux variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ choisis.

Afin d'éviter d'obtenir des amplitudes de contraintes appliquées trop importantes, on cherche à déterminer les paires de variants de macle présentant les facteurs de Schmid les plus élevés. Pour cela, on fixe les vecteurs $\tilde{\eta}_1^{(i)}$ et $\tilde{K}_1^{(i)}$ des douze variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ et on calcule le facteur de Schmid $SF^{(i)}$ pour un axe de traction \underline{t} tournant autour d'une sphère unité (360×180 degrés pour la discrétisation dans le repère sphérique). On récupère alors 4 combinaisons possibles de deux variants présentant un SF qui vaut 0,458, valeur la plus haute possible pour une paire de variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Pour information, ces 4 combinaisons sont répertoriées dans le tableau 4.5, avec les coordonnées t_x, t_y, t_z du vecteur \underline{t} dans le repère cubique de base $\mathcal{B} = (\underline{X}, \underline{Y}, \underline{Z})$, où $\underline{X} = [100]$, $\underline{Y} = [010]$ et $\underline{Z} = [001]$.

On s'intéresse à la combinaison (1) présentée dans le tableau 4.5. On prend alors en compte les variants 7 et 10, c.-à-d. les variants $(\bar{3}2\bar{3}) [\bar{1}\bar{3}\bar{1}]$ et $(2\bar{3}\bar{3}) [\bar{3}\bar{1}\bar{1}]$ (voir tableau B.1 de l'Annexe B). Pour ces deux variants, le SF est identique et vaut 0,458 pour la direction de traction $\underline{t} = (-0,47, 0,47, 0,74)_{\mathcal{B}}$, proche d'une direction $[\bar{2}23]$. En utilisant l'équation (4.18), on déduit la valeur de l'amplitude de traction σ^0 à appliquer, qui est alors de l'ordre de 8,5 GPa.

Combinaison	(t_x, t_y, t_z)	Paire de variants
(1)	(0,47, 0,47, 0,74)	7 et 10
(2)	(−0,47, 0,47, 0,74)	3 et 8
(3)	(−0,47, −0,47, 0,74)	4 et 6
(4)	(0,47, −0,47, 0,74)	5 et 9

TABLEAU 4.5 – Combinaisons de paires de variants ayant le plus haut SF ($= 0,458$) dans le cas d’une traction uniaxiale de direction \underline{t} . Les numérotations de variants correspondent à celles présentées dans le [tableau B.1](#) de l’[Annexe B](#).

Dès lors, on peut construire le tenseur des contraintes appliquées ($\underline{\sigma}^{app}$ dans le CGL) correspondant à une traction de 8,5 GPa le long de \underline{t} , exprimé dans la base \mathcal{B} :

$$\underline{\sigma}^{app} = \begin{pmatrix} 1,903 & 1,903 & 2,989 \\ 1,903 & 1,903 & 2,989 \\ 2,989 & 2,989 & 4,694 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}, \quad (4.21)$$

où chaque composante est exprimée en GPa.

Dans un premier temps, le tenseur des contraintes appliquées $\underline{\sigma}^{app}$ est introduit comme condition limite périodique à une simulation réalisée dans le CGL. On considère alors deux germes de variants de macles sphériques (variants de macle 7 et 10), dont les centres sont respectivement situés à $\left(\frac{N_x}{4}, \frac{N_y}{2}, \frac{N_z}{2}\right)$ et $\left(\frac{3N_x}{4}, \frac{N_y}{2}, \frac{N_z}{2}\right)$. Les données d’entrée sont spécifiées dans les [tableaux 4.1](#) et [4.2](#) (constantes élastiques isotropes). Les tenseurs gradients de déplacement $\nabla \underline{u}^{0(7)}$ et $\nabla \underline{u}^{0(10)}$ intrinsèques aux deux variants de macle étudiés, introduits dans l’équation (4.13), sont les suivants :

$$\nabla \underline{u}^{0(7)} = \begin{pmatrix} 0,068 & -0,045 & 0,068 \\ 0,205 & -0,136 & 0,205 \\ 0,068 & -0,045 & 0,068 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}, \quad \text{et} \quad \nabla \underline{u}^{0(10)} = \begin{pmatrix} -0,136 & 0,205 & 0,205 \\ -0,045 & 0,068 & 0,068 \\ -0,045 & 0,068 & 0,068 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}. \quad (4.22)$$

L’évolution de la fraction volumique $\langle \varphi^{(i)} \rangle$ de chacun des variants en fonction du nombre de pas de temps de calcul est alors présentée sur la [figure 4.10](#). On voit alors que le tenseur de contraintes appliquées $\underline{\sigma}^{app}$ choisi permet bien la croissance des deux variants. Les deux variants croissent alors jusqu’à remplir chacun près de 50% de la boîte de simulation à $\tilde{t} = 2200 \tilde{dt}$ ($\tilde{t} = 352$). Cela est dû au fait que les deux variants de macle ont théoriquement le même SF par rapport à la contrainte imposée. On note cependant que l’un des deux variants de macle est finalement sélectionné pour remplir entièrement la boîte de simulation, au détriment du second variant de macle (dans ce cas, croissance favorisée du variant de macle 7). Si l’opération de symétrie entre les deux variants était parfaitement respectée lors de l’évolution, le système atteindrait un état stationnaire où il conserverait les deux variants de macle à proportion égale. Cependant, la présence de bruit numérique (accumulation d’erreurs due au différents

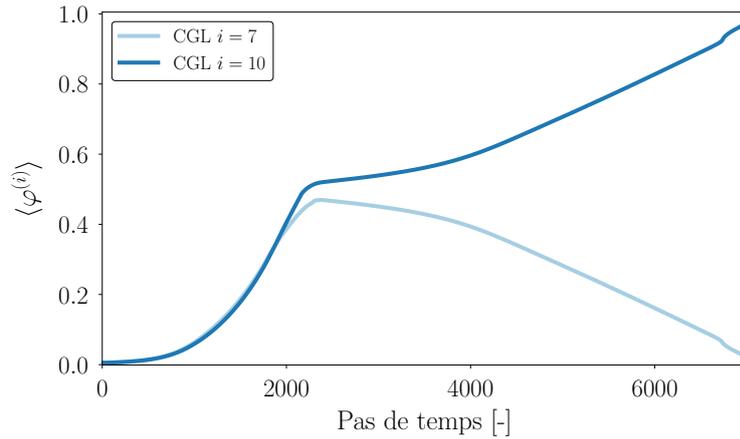


FIGURE 4.10 – Évolution temporelle de la valeur moyenne des champs $\varphi^{(7)}$ et $\varphi^{(10)}$ dans le CGL, dans le cas de la contrainte appliquée définie dans l'équation (4.21). Le facteur de Schmid est identique et égal à 0,458 pour les deux variants de macle.

changements de base, oscillations induites par le solveur mécanique instable, ...) favorise finalement la croissance d'un variant de macle au détriment de l'autre.

Ainsi, la méthodologie employée permet bien de déterminer un tenseur de contraintes appliquées σ^{app} conduisant à la croissance de deux variants de macle $\{332\}$. Afin d'éviter de remplir entièrement la boîte de simulation de variants de macle, on cherche à considérer des conditions aux limites en déformation appliquée. Pour ces simulations, afin d'assurer la croissance simultanée de ces deux variants, nous avons appliqué la déformation moyenne mesurée dans le calcul précédent à $\tilde{t} = 0$. Le tenseur $\langle \underline{\varepsilon} \rangle$ obtenu à $\tilde{t} = 0$ est le suivant :

$$\langle \underline{\varepsilon} \rangle = \begin{pmatrix} -0,009 & 0,038 & 0,059 \\ 0,038 & -0,009 & 0,059 \\ 0,059 & 0,059 & 0,050 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}} . \quad (4.23)$$

Si on s'intéresse au tenseur $\langle \underline{\varepsilon} \rangle$ exprimé dans la base $\mathcal{B}^{(i)} = (\tilde{\eta}_1^{(i)}, \tilde{K}_1^{(i)}, \tilde{P}^{(i)})$ des variants 7 et 10, on obtient :

$$\langle \underline{\varepsilon} \rangle = \begin{pmatrix} 0,060 & 0,078 & 0,026 \\ 0,078 & 0,0105 & 0,020 \\ 0,026 & 0,020 & -0,039 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}^{(7)}} , \quad \text{et} \quad \langle \underline{\varepsilon} \rangle = \begin{pmatrix} 0,060 & 0,078 & -0,026 \\ 0,078 & 0,105 & -0,020 \\ -0,026 & -0,020 & -0,039 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}^{(10)}} . \quad (4.24)$$

On note alors que dans les bases $\mathcal{B}^{(7)}$ et $\mathcal{B}^{(10)}$ des deux variants de macle, la composante $\langle \underline{\varepsilon} \rangle_{12}$ a une valeur de 7,8%, ce qui correspond bien à l'ordre de grandeur du seuil de déformation à appliquer dans la base d'un variant de macle afin que celui-ci croisse dans le CGL (voir Section 2.4.1, cas des déformations appliquées).

Dès lors, on applique des conditions limites périodiques en déformation appliquée afin de limiter la fraction volumique finale de chacun des variants, et d'étudier la morphologie obtenue à l'équilibre

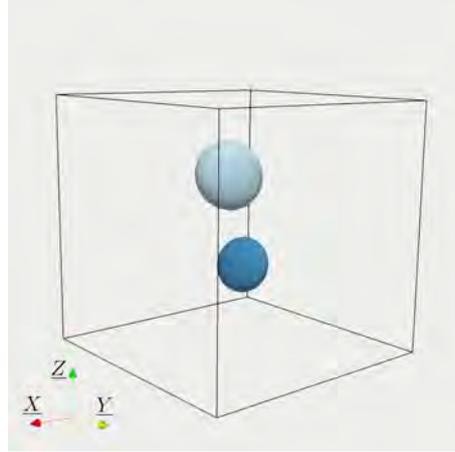


FIGURE 4.11 – Isosurfaces à 0,5 des champs $\varphi^{(7)}$ et $\varphi^{(10)}$ à l’instant initial pour les simulations dans le CGL et CGNL en déformation appliquée pour les variants de macle 7 (en bleu clair) et 10 (en bleu foncé). Le repère de la boîte de simulation correspond au repère cubique de base $\mathcal{B} = (\underline{X}, \underline{Y}, \underline{Z})$, où $\underline{X} = [100]$, $\underline{Y} = [010]$ et $\underline{Z} = [001]$.

en partant d’une configuration initiale composée de germes de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Ce cas sera étudié dans le CGL et le CGNL afin d’analyser l’importance de la prise en compte des non-linéarités géométriques sur l’évolution microstructurale de deux variants en interaction.

On s’intéresse à un cas similaire à la configuration (3) étudiée dans la Section 4.2, c.-à-d. la prise en compte de germes ellipsoïdaux allongés selon $\underline{K}_1^{(i)}$, dont les demi-axes respectifs le long des directions $\eta_1^{(i)}$, $\underline{K}_1^{(i)}$ et $\underline{P}^{(i)}$ sont égaux à $a = 10$ nm, $b = 16$ nm et $c = 12$ nm. Deux germes sont disposés au sein de la boîte de simulation : le premier, correspondant au germe de associé au variant de macle (7), est situé en $\left(\frac{3N_x}{4}, \frac{3N_y}{4}, \frac{3N_z}{4}\right)$ et le second, correspondant au germe de associé au variant de macle (10), est situé en $\left(\frac{N_x}{4}, \frac{N_y}{4}, \frac{N_z}{4}\right)$. La configuration initiale est présentée sur la figure 4.11.

Un tenseur de déformation $\underline{\varepsilon}^{app}$ est appliqué dans le CGL et un tenseur gradient de transformation $\underline{\tilde{F}}^{app}$ est appliqué dans le CGNL. Ceux-ci sont basés sur l’expression du tenseur de déformation moyen donné dans l’équation (4.23). Dans le CGL, on écrit :

$$\langle \underline{\varepsilon} \rangle^{app} = \begin{pmatrix} -0,009 & 0,038 & 0,059 \\ 0,038 & -0,009 & 0,059 \\ 0,059 & 0,059 & 0,050 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}. \quad (4.25)$$

Un tenseur $\nabla \underline{u}^{app} = \langle \underline{\varepsilon} \rangle^{app}$ symétrique est tiré de ce tenseur. On écrit ensuite $\langle \underline{\tilde{F}} \rangle^{app} = \underline{\mathbb{I}} + \nabla \underline{u}^{app}$, ce qui nous donne :

$$\langle \underline{\tilde{F}} \rangle^{app} = \begin{pmatrix} 0,991 & 0,038 & 0,059 \\ 0,038 & 0,991 & 0,059 \\ 0,059 & 0,059 & 1,050 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}. \quad (4.26)$$

On vérifie bien l’équation (4.9), tout en gardant le caractère symétrique de la déformation appliquée.

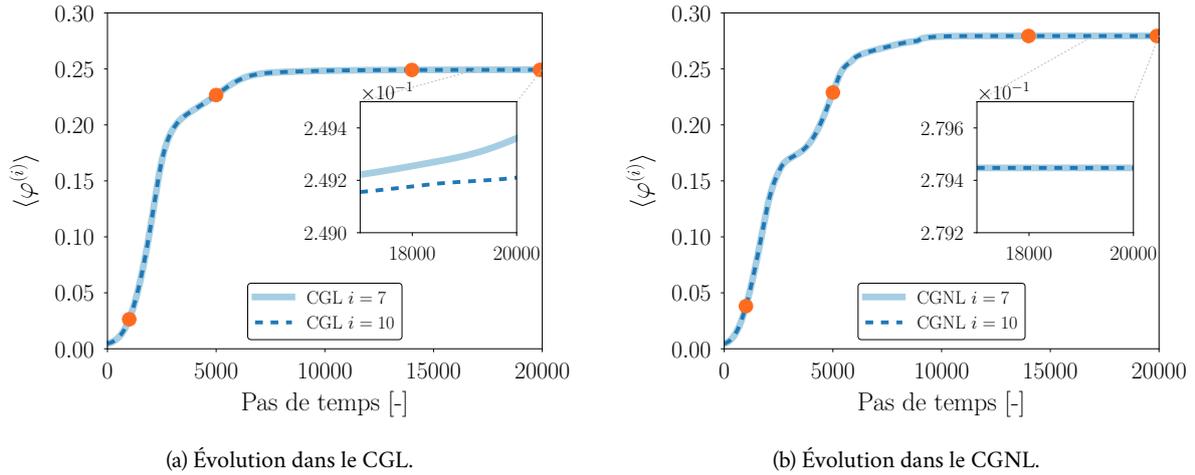


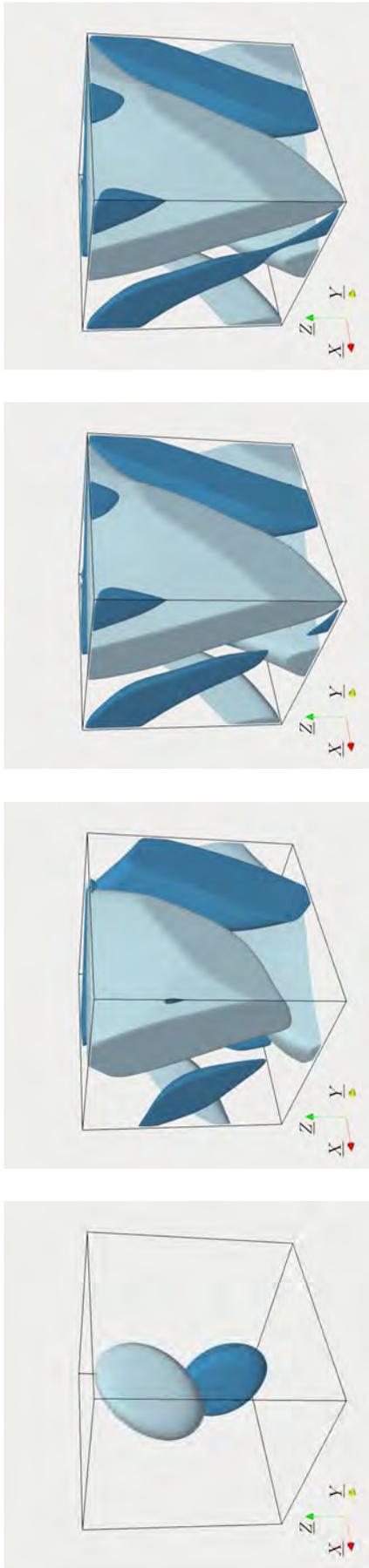
FIGURE 4.12 – Évolution temporelle de la valeur moyenne des champs $\varphi^{(7)}$ et $\varphi^{(10)}$ dans le cas de la configuration initiale présentée sur la figure 4.11 en déformation appliquée, (a) dans le CGL et (b) dans le CGNL. Les points orange à $\tilde{t} = 1000 \tilde{dt}$ ($\tilde{t} = 160$), $\tilde{t} = 5000 \tilde{dt}$ ($\tilde{t} = 800$), $\tilde{t} = 14000 \tilde{dt}$ ($\tilde{t} = 2240$) et $\tilde{t} = 20000 \tilde{dt}$ ($\tilde{t} = 3200$) correspondent aux configurations présentées sur la figure 4.13.

La figure 4.12 montre l'évolution de la valeur moyenne des champs $\varphi^{(i)}$ dans le CGL et dans le CGNL pour chacun des variants de macle. À première vue, dans chacun des cadres étudiés, la fraction volumique des variants 7 (trait plein) et 10 (pointillés) est la même au cours du temps, jusqu'en fin de simulation où l'on atteint un état qui semble stationnaire. Or, on note que les fractions volumiques finales atteintes dans le CGL et le CGNL ne sont pas du même ordre de grandeur. L'encart de la figure 4.12a montre alors que les deux variants de macle continuent de croître dans le cas du CGL, contrairement au cas étudié dans le CGNL où la microstructure atteint un état stationnaire à partir de 14000 pas de temps. Il est alors intéressant d'observer l'état de la microstructure à différents instants de l'évolution afin de se rendre compte de l'origine de ces différences observées à une échelle supérieure (points orange sur les courbes de la figure 4.12).

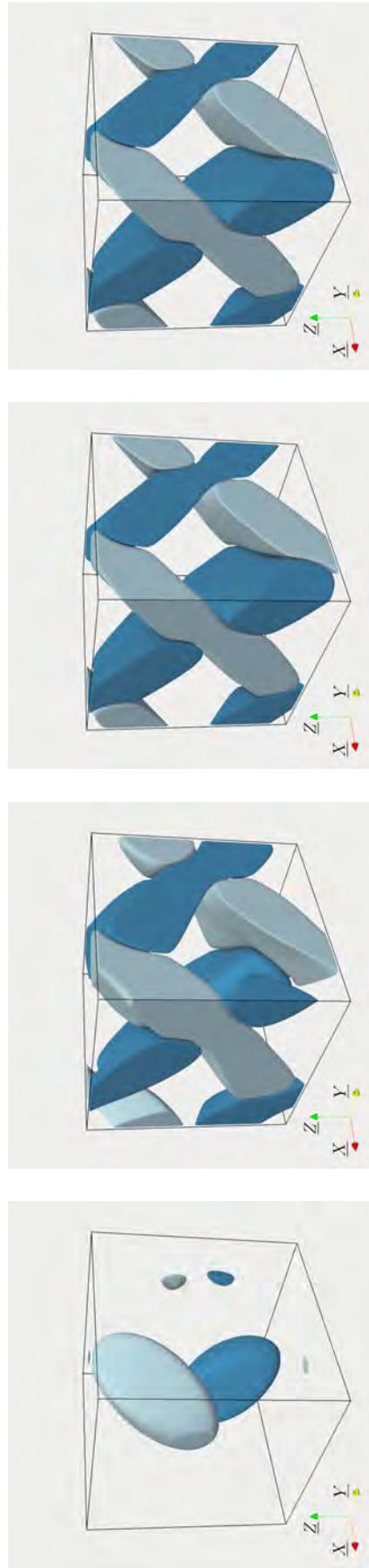
L'évolution spatio-temporelle des champs $\varphi^{(7)}$ et $\varphi^{(10)}$ dans le CGL et dans le CGNL est présentée sur la figure 4.13, de $\tilde{t} = 160$ à $\tilde{t} = 3200$. On rappelle que la configuration initiale présentée sur la figure 4.11 est similaire à la configuration (3) présentée dans la figure 4.1c pour un seul variant de macle. On voit alors que l'évolution de la microstructure est à nouveau très différente dans le CGL et dans le CGNL. On note que dans les deux cadres étudiés, les variants de macles croissent de manière à former des lamelles qui s'enchevêtrent, mais que leurs orientations sont très différentes. En effet, dans le CGNL, la microstructure évolue rapidement vers une morphologie en "squelette", typique des microstructures observées expérimentalement où la matrice se retrouve quadrillée par des variants de macle différents (voir figure 4.14).

La figure 4.15 montre une coupe de normale $\underline{P}^{(10)}$ du champ $\varphi^{(10)}$ (en bleu foncé) passant par le centre de la boîte, dans le CGL (figures 4.15a et 4.15b) et dans le CGNL (figures 4.15c et 4.15d). Ces coupes permettent d'observer les interfaces favorisées par le système lors de la croissance du variant de macle. C'est ainsi que l'on peut voir sur la figure 4.15a que, malgré l'enchevêtrement de lamelles

Évolution dans le CGL



Évolution dans le CGNL



(a) $\tilde{t} = 160$.

(b) $\tilde{t} = 800$.

(c) $\tilde{t} = 2240$.

(d) $\tilde{t} = 3200$.

FIGURE 4.13 – Évolution des isosurfaces $\varphi^{(7)} = 0,5$ et $\varphi^{(10)} = 0,5$ dans le cas de la configuration initiale présentée sur la figure 4.1, dans le CGL (partie du haut) et dans le CGNL (partie du bas). En bleu clair le variant de macle $i = 7$ et en bleu foncé le variant de macle $i = 10$.

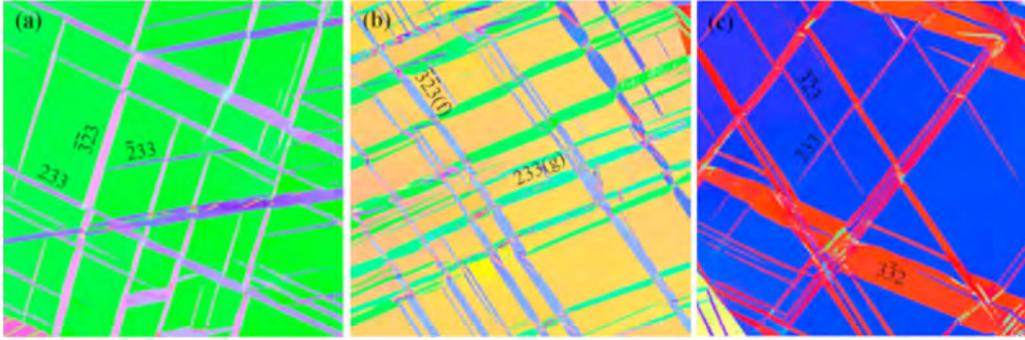


FIGURE 4.14 – Micrographies EBSD (Electron BackScattered Diffraction) d’un alliage de titane β -métastable Ti-15Mo après traction uniaxiale à 5% à température ambiante. Chacune des micrographies montre l’intérieur d’un grain (couleur de fond) traversé par plusieurs variants de macle $\{332\}$ formant une microstructure en “squelette”. Figure tirée de Zhou *et al.* [2017].

observé dans le CGL, celles-ci croissent en favorisant la présence de l’interface normale à $\underline{\eta}_1^{(10)}$, interface non-observée expérimentalement. Par contre, dans le CGNL, on peut voir sur la figure 4.15c que les interfaces favorisées sont normales à $\underline{K}_1^{(10)}$, interfaces observées expérimentalement. Cette analyse géométrique réalisée sur le variant de macle 7 mène aux mêmes observations.

Ces résultats sont cohérents avec ceux obtenus dans le cas de l’étude mono-variant réalisée dans la Section 4.2, qui ont montré que dans le CGL, les interfaces de croissance peuvent être normales à $\underline{\eta}_1$ et \underline{K}_1 alors que dans le CGNL, ce sont les interfaces normales à \underline{K}_1 et \underline{K}_2 qui sont favorisées lors de la croissance (principalement \underline{K}_1 dans le cas des conditions aux limites considérées). On retrouve ici l’importance de la prise en compte du CGNL lors de la formulation de l’énergie élastique.

Cependant, lorsque l’on atteint un état stationnaire en fin de simulation (plus d’évolution des champs $\varphi^{(7)}$ et $\varphi^{(10)}$ dans le CGNL), on note sur la figure 4.15d que la lamelle obtenue dans le CGNL n’est pas parfaitement orientée perpendiculairement à $\underline{K}_1^{(10)}$. En effet, on note une désorientation de $\theta \approx 10^\circ$ entre $\underline{K}_1^{(10)}$ et la normale à la lamelle obtenue, ce qui n’était pas un résultat attendu. En effet, dans le cas mono-variant étudié, la figure 4.5 montre bien l’obtention d’une lamelle normale à \underline{K}_1 en partant d’une configuration initiale similaire, avec un seul variant de macle. Ce résultat était conforme avec le fait que le plan de normale \underline{K}_1 est un plan d’habitat, minimisant l’énergie élastique dans le système. Les différences majeures entre ces deux résultats sont (i) la présence d’un second variant au sein du système étudié, et (ii) le choix de la base de la boîte de simulation, qui était prise selon les axes du repère du variant de macle étudié dans la Section 4.2. On cherche alors à savoir si la présence du second variant de macle dans le système induit une rotation des interfaces macle-matrice précédemment obtenues, ou si ce phénomène est dû au choix des directions des conditions limites périodiques.

4.3.3 Effet des conditions limites périodiques sur les morphologies obtenues

On considère tout d’abord une simulation dans le CGNL avec un seul variant de macle (variant de macle 7 dans ce cas), avec un germe initial dimensionné de la même manière que dans la configuration initiale n°3 étudiée dans la Section 4.2. On considère cette fois le repère de la boîte de simulation comme étant le repère cubique de base \mathcal{B} , et non le repère lié au variant de macle. L’évolution du variant de

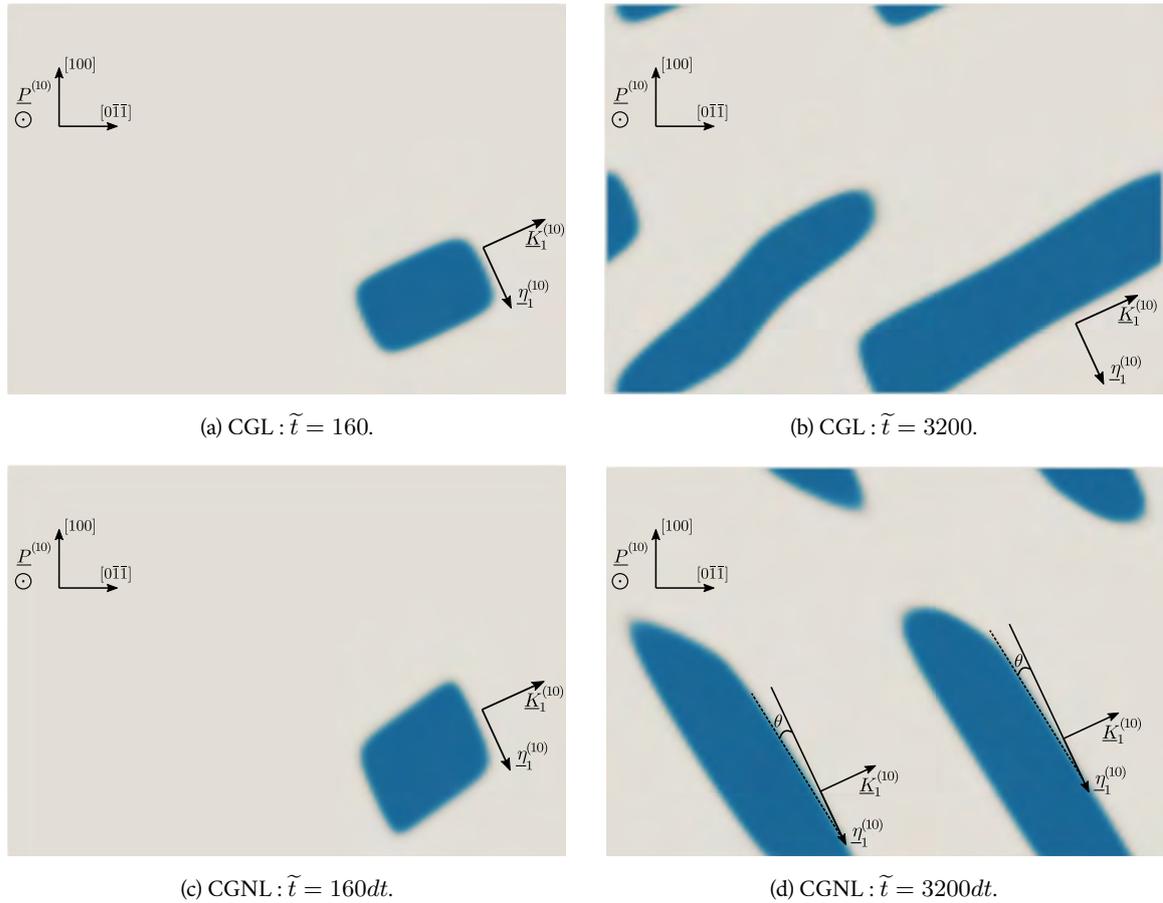


FIGURE 4.15 – Évolution d’une section de normale $\underline{P}^{(10)} = [0\bar{1}1]$ du champ $\varphi^{(10)}$ passant par le centre de la boîte dans les simulations 3D présentées sur la figure 4.13 dans le CGL (a, b) et dans le CGNL (c, d). La direction de maillage $\underline{\eta}_1^{(10)}$ et la normale au plan de maillage $\underline{K}_1^{(10)}$ sont spécifiées sur chacune des figures. (a) et (c) correspondent à une configuration en début d’évolution ($\tilde{t} = 160$), (b) et (d) à une configuration en fin de simulation ($\tilde{t} = 3200$).

macles 7, seul dans la matrice, est montrée sur la figure 4.16. La boîte a pour dimension $64 \times 64 \times 64$ nœuds le long des directions \underline{X} , \underline{Y} et \underline{Z} (vecteurs composants la base \mathcal{B}). Le germe de macles est placé au centre de celle-ci.

La croissance du variant de macles 7 seul dans la matrice est similaire à celle du variant de macles 10 dans la simulation multi-variants (7 et 10) présentée sur les figures 4.15c et 4.15d. En début d’évolution, on voit sur la figure 4.16a que le variant de macles (7) croît de manière à favoriser l’interface de normale $\underline{K}_1^{(7)}$. Cependant, on peut voir qu’en fin de simulation, la microstructure lamellaire obtenue est désorientée d’un angle θ de valeur identique à celle obtenue dans la simulation multi-variants pour le variant de macles 10 (voir figure 4.15d). Ainsi, cette désorientation n’est pas due à la présence d’autres variants de macles mais au fait que l’on considère des conditions limites périodiques dans une boîte cubique, et que les dimensions du variant de macles ne sont pas petites vis-à-vis des dimensions de la boîte. Quand le variant de macles atteint une longueur proche de celle de la boîte, ses interactions avec ses répliques périodiques deviennent importantes et on observe que, pour la boîte de simulation

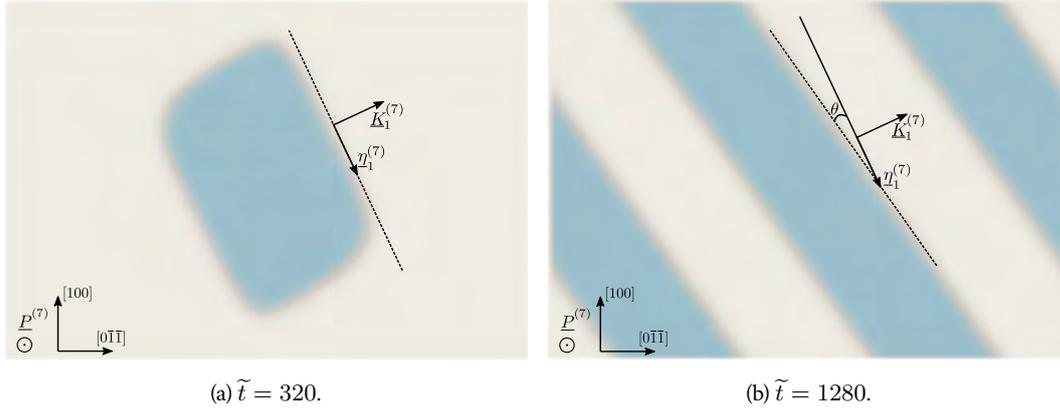


FIGURE 4.16 – Évolution d'une section normale à $\underline{P}^{(7)} = [10\bar{1}]$ du champ $\varphi^{(7)}$ passant par le centre de la boîte dans une simulation 3D mono-variant dans le CGNL, boîte de simulation $64 \times 64 \times 64$. (a) En début de simulation ($\tilde{t} = 320$) et (b) en fin de simulation, à l'équilibre ($\tilde{t} = 1280$).

considérée ici, l'interface qui était normale à $\underline{K}_1^{(7)}$ tourne progressivement d'un angle θ qui atteint une valeur de l'ordre de 10° quand la microstructure en plaquette est formée. Cette interface ne minimise par l'énergie élastique dans le système (seuls les plans d'habitat identifiés dans la Section 4.2.4 le permettent). Nous avons observé que l'énergie élastique stockée dans la microstructure en plaquettes désorientées de θ par rapport au plan d'habitat modifie qualitativement l'évolution microstructurale quand on relâche les contraintes ($\underline{P}^{app} = 0$) : en effet, la microstructure n'est pas stable, et on observe un retour vers la matrice initiale (dé-maclage).

Pour une boîte cubique, si la macle était infiniment fine, elle pourrait croître sans se réorienter en voyant des répliques dues aux conditions limites périodiques. Comme la macle a ici une certaine épaisseur, lorsqu'elle atteint une taille de l'ordre de grandeur de la taille de la boîte, elle fusionne avec une réplique qui n'est pas alignée avec la direction $\underline{K}_1^{(7)}$, ce qui modifie l'orientation de la lamelle obtenue. En gardant des conditions limites périodiques en déformation appliquée au cas de la croissance du variant de macle (7), on s'intéresse maintenant à des boîtes parallélépipédiques de formes différentes. On fait varier le nombre de nœuds N_y , en gardant $N_x = N_z = 64$. Plus précisément, on s'intéresse alors à la configuration lamellaire finale obtenue dans le cas du variant 7, pour différentes tailles de boîte : (a) $64 \times 64 \times 64$, (b) $64 \times 128 \times 64$, (c) $64 \times 192 \times 64$ et (d) $64 \times 256 \times 64$. Les dimensions de la boîte (c) sont choisies de manière à avoir une boîte telle que la valeur de $\tan(\widehat{\underline{K}_1^{(7)}, Y})$ soit la plus proche possible de $N_y/N_{[0\bar{1}\bar{1}]}$, où $N_{[0\bar{1}\bar{1}]}$ est le nombre de nœuds le long de l'axe $[0\bar{1}\bar{1}]$, fixé par la condition $N_x = N_z = 64$. Les configurations finales obtenues pour chacune des boîtes sont montrées sur la figure 4.17.

Le résultat présenté sur la figure 4.17a correspond à ce qui a été observé précédemment dans une boîte de simulation $64 \times 64 \times 64$. Sur la figure 4.17b, le nombre de nœuds selon Y est doublé, et on note que l'angle entre la lamelle obtenue et le plan de maclage de normale $\underline{K}_1^{(7)}$, noté ζ , est proche de $\theta/2$. De même, on note la même désorientation dans le cas où l'on considère une boîte 4 fois plus allongée selon Y (figure 4.17d). On voit alors que seule la configuration (c) permet d'obtenir une orientation

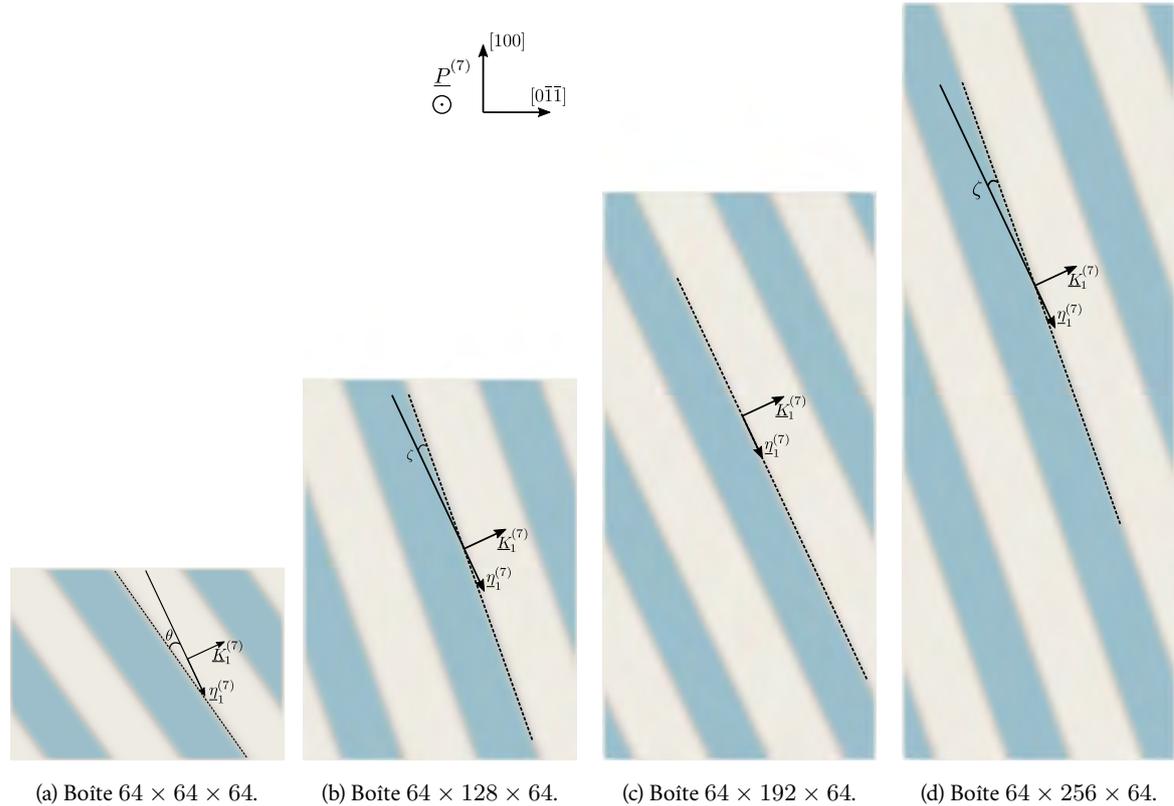


FIGURE 4.17 – Section de normale $\underline{P}^{(7)} = [10\bar{1}]$ de la configuration finale du champ $\varphi^{(7)}$ dans des simulations 3D mono-variant dans le CGNL pour des boîtes de simulation de taille différente : (a) $64 \times 64 \times 64$, (b) $64 \times 128 \times 64$, (c) $64 \times 192 \times 64$ et (d) $64 \times 256 \times 64$.

de lamelle correspondant bien au plan de maillage du variant de macle 7 dans la microstructure finale (figure 4.17c). Ainsi, l'énergie élastique est parfaitement relaxée et on vérifie que, dans ce cas, la microstructure établie reste en place lorsque l'on relâche les contraintes extérieures ($\underline{P}^{app} = 0$). Dès lors, si l'on souhaite obtenir des configurations finales où les interfaces des lamelles obtenues concordent avec les plans d'habitat de deux variants de macle, la condition de commensurabilité doit être vérifiée pour ces deux variants, ce qui donne une géométrie exotique à traiter avec des conditions limites périodiques.

Dès lors, deux solutions sont envisagées afin d'obtenir une microstructure finale en bon accord avec les observations expérimentales. La première consiste en la prise en compte d'une boîte de simulation beaucoup plus grande où l'on considèrera un nombre plus importants de germes initiaux. Ainsi, on se limiterait à l'observation de l'évolution de la microstructure avant que les variants de macle n'atteignent les "bords" de la boîte de simulation. Cette solution s'annonce cependant coûteuse en terme de mémoire et de temps de calcul. La deuxième solution envisagée se base sur des conditions de surfaces libres en bord de boîte, et est détaillée dans la sous-section suivante.

4.3.3.1 Surfaces libres en conditions limites périodiques

Afin de considérer des surfaces libres dans la simulation, tout en restant dans le cadre de conditions limites périodiques, le choix le plus simple consiste à considérer un champ supplémentaire, noté ψ , au

sein du modèle champ de phase multi-variants développé dans cette section. Ce champ va permettre de représenter le vide autour du système et est considéré invariant dans le temps. Ce champ ψ vaut 1 dans le vide et 0 dans le matériau. Il est choisi diffus pour des raisons numériques.

La présence de ce champ modifie le modèle à deux niveaux. Tout d'abord, on introduit un terme de pénalisation dans l'énergie chimique de manière à empêcher la propagation d'une macle dans le vide. Ainsi, le terme d'énergie chimique s'écrit :

$$\mathcal{F}_{int} = \int_{\Omega} \left\{ Wg(\varphi^{(7)}) + \frac{\alpha}{2} |\nabla\varphi^{(7)}|^2 + A_{\gamma}(\varphi^{(7)})^2(\psi)^2 \right\} dV, \quad (4.27)$$

où, pour alléger les notations, le nouveau modèle est présenté pour une situation ne comportant que le variant de macle 7.

Ensuite, le champ ψ modifie le comportement mécanique en annulant les constantes élastiques dans le vide. Dans la situation de constantes élastiques isotropes considérée ici, on écrit simplement :

$$\underline{\lambda} = \underline{\lambda}^{(m)} [1 - h(\psi)]. \quad (4.28)$$

Ce modèle a l'avantage de la simplicité. Il a toutefois le défaut de traiter différemment les interfaces matrice-vide et macle-vide. Nous reviendrons sur ce point dans la discussion des résultats.

On considère ici une surface libre normale à la direction \underline{Y} à l'aide du champ ψ , visible en bleu foncé sur la [figure 4.18](#). Les conditions aux limites périodiques alors associées à cette surface libre crée une géométrie de lame mince, où la surface libre se retrouve de part et d'autre de la boîte de simulation dans la direction \underline{Y} . L'épaisseur du champ ψ est prise égale à 7 nœuds dans la direction \underline{Y} , et a les dimensions de la boîte de simulation dans les directions \underline{X} et \underline{Z} . Ainsi, le variant de macle ne peut ressentir les effets de la présence de répliques dues aux conditions limites périodiques dans la direction \underline{Y} . Ce choix nous permettra de comparer la microstructure obtenue avec les résultats présentés dans le cas de la croissance du variant de macle 7 avec prise en compte de conditions limites périodiques sans surfaces libres ([figure 4.17](#)).

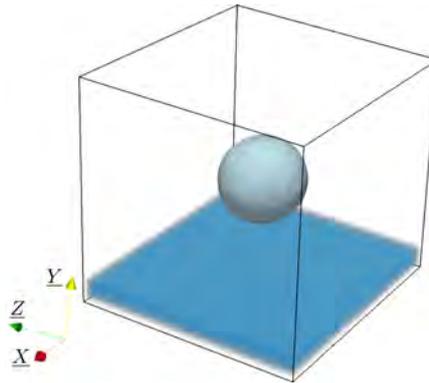


FIGURE 4.18 – Configuration initiale de la simulation mono-variant (variant de macle 7 sphérique de rayon $R_0 = 12$ nm, en bleu clair) dans une boîte $64 \times 64 \times 64$. En bleu foncé, un champ supplémentaire, noté ψ , d'épaisseur 7 nœuds, représente une surface libre normale à \underline{Y} .

Un tenseur de contraintes \underline{P}^{app} exprimé de la même manière que le tenseur $\underline{\sigma}^{app}$ de l'équation (4.21) est appliqué. Ce dernier est issu d'une traction de 8,5 GPa dans la direction maximisant les facteurs de

Schmid des variants 7 et 10 (voir [Section 4.3.2](#)). Au cours de la simulation, on observe une disparition du germe initial. Or, le même test, réalisé sans prise en compte de surfaces libres, provoque bien la croissance du germe de macle dans la boîte de simulation. En considérant maintenant une amplitude de traction de 9,5 GPa, on note une croissance du germe initial. Ainsi, la prise en compte de surfaces libres dans la simulation (relativement proches du germe de macle) induit une augmentation du seuil de contrainte nécessaire à la croissance du variant de macle étudié (seuil calculé dans le [Chapitre 2, Section 2.4.1](#) dans le CGL et dans le cas d'un germe situé dans une matrice infinie). En prenant en compte cette modification, le tenseur de déformation \tilde{F}^{app} nécessaire à la croissance du germe de macle initial est re-déterminé en appliquant la méthodologie employée dans la [Section 4.3.2](#). Il s'exprime de la façon suivante :

$$\langle \tilde{F} \rangle^{app} = \begin{pmatrix} 0,987 & 0,056 & 0,088 \\ 0,056 & 0,987 & 0,088 \\ 0,088 & 0,088 & 1,075 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}}. \quad (4.29)$$

La [figure 4.19](#) montre la configuration du champ $\varphi^{(7)}$ obtenue en fin de simulation. Comme observé dans l'ensemble des calculs réalisés dans le CGNL sans surfaces libres, le variant de macle croît de manière anisotrope jusqu'à atteindre une morphologie lamellaire. En considérant des conditions limites périodiques classiques sur les faces de normale \underline{X} et \underline{Z} , on induit la création de répliques du variant de macle dans la boîte de simulation. La configuration finale alors obtenue est semblable à ce qui était observé dans le cas d'une boîte $64 \times 64 \times 64$ sans surfaces libres ([figure 4.17a](#)). Cependant, on note que l'interface macle-matrice finalement obtenue dans ce cas est bien l'interface attendue, c.-à-d. une interface de normale $\underline{K}_1^{(7)}$ ([figure 4.19b](#)).

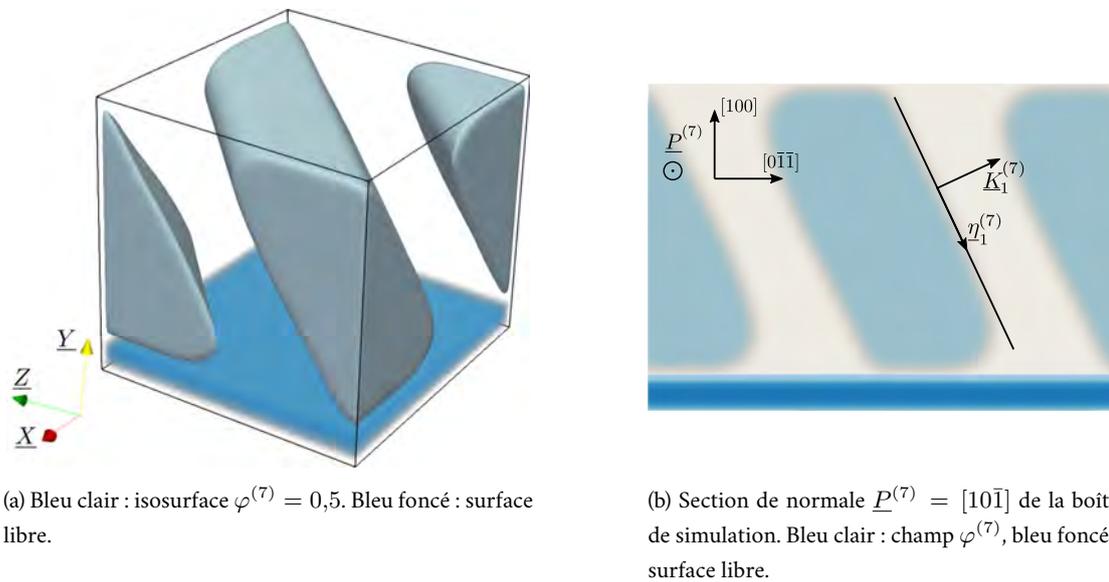


FIGURE 4.19 – Représentation dans l'état de référence de la configuration finale obtenue dans le cas de la croissance d'un germe de variant de macle 7 dans une boîte $64 \times 64 \times 64$ où la surface de normale Y est considérée comme une surface libre.

En l'absence de surfaces libres, les résultats présentés sur la [figure 4.17](#) montraient que l'orienta-

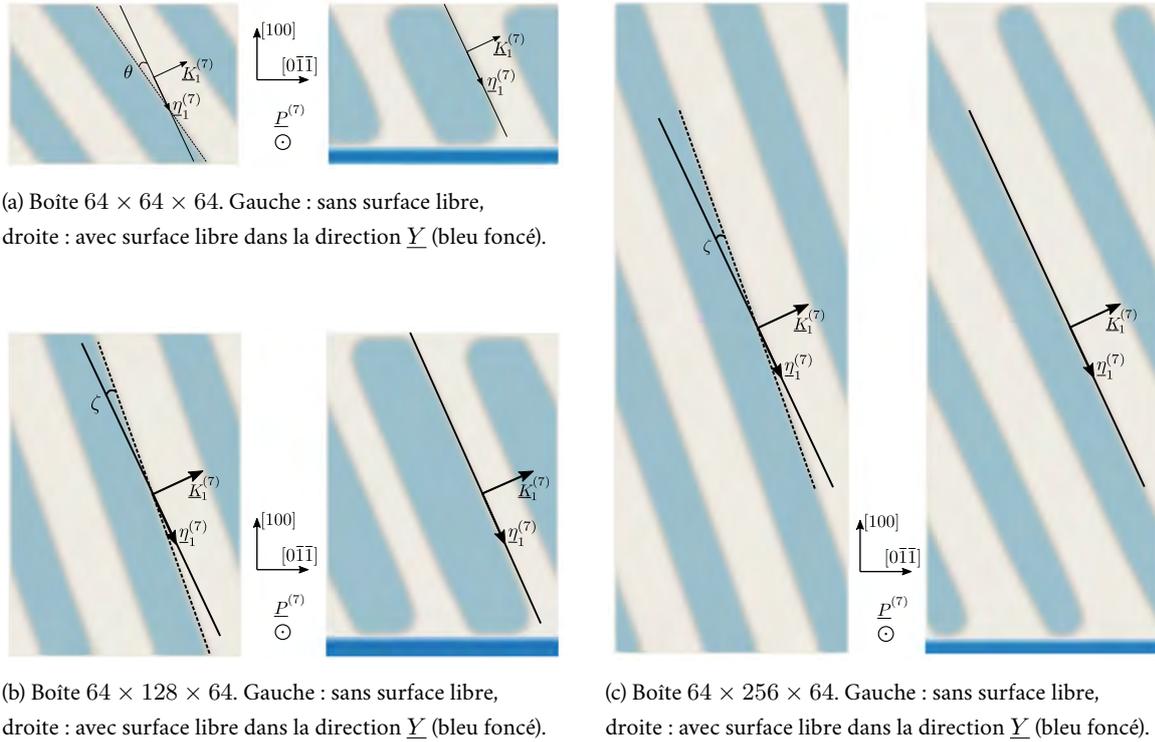


FIGURE 4.20 – Comparaison des configurations finales sur une section de normale $\underline{P}^{(7)} = [10\bar{1}]$, obtenues dans le cas de la croissance d'un germe sphérique de variant de macle 7 de rayon initial $R_0 = 12$ nm dans une boîte (a) $64 \times 64 \times 64$, (b) $64 \times 128 \times 64$, (c) $64 \times 256 \times 64$, sans surfaces libres (gauche) et avec surface libre normale à la direction \underline{Y} (droite). En bleu clair, le champ de phase représentant le variant de macle 7, en bleu foncé le champ de phase associé à la surface libre. Les repères représentés sur chacune des figures sont identiques.

tion finale des lamelles au sein de la microstructure macle-matrice dépendait de la forme de la boîte de simulation. Différentes configurations alors envisagées sont reprises en considérant cette fois une surface libre perpendiculaire à la direction \underline{Y} . La comparaison des configurations finales obtenues avec et sans prise en compte de surfaces libres est montrée dans une section de normale $\underline{P}^{(7)}$ sur la figure 4.20. Trois tailles de boîte sont considérées : $64 \times 64 \times 64$ nœuds sur la figure 4.20a, $64 \times 128 \times 64$ nœuds sur la figure 4.20b et $64 \times 256 \times 64$ nœuds sur la figure 4.20c. Pour chacun des cas, on retrouve à gauche la configuration finale obtenue dans le cas sans surface libre, et à droite avec surface libre perpendiculaire à la direction \underline{Y} (représentée en bleu foncé). On voit alors que l'interface macle-matrice obtenue est bien normale à $\underline{K}_1^{(7)}$ dans le cas où l'on considère une surface libre dans la direction \underline{Y} , pour toutes les tailles de boîte considérées.

La mise en place des surfaces libres dans ce modèle a été pensée dans le but de limiter l'interaction entre le variant de macle et ses répliques, qui provoquait une désorientation des microstructures lamellaires obtenues dans le cas sans surface libre. Ce calcul montre bien que l'étude de surfaces libres est possible, même si l'on utilise des conditions limites périodiques et une approche de résolution spectrale (voir par exemple Salman [2009]).

Ce type d'approche pourrait en particulier être utilisée afin de mieux comprendre l'origine des déformations de surface observées lors du maclage. Il s'agit d'une perspective intéressante pour ce modèle,

qui permettrait de mesurer les déformations en surface, pouvant être comparées à des mesures expérimentales. Dans la littérature, on retrouve quelques résultats expérimentaux traitant de l'étude du maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ en contact avec une surface libre. On peut y voir que la présence de surfaces libres peut induire des résultats inattendus. [Lai et al. \[2016\]](#), après calcul géométrique du cisaillement induit par la présence d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ en surface d'une lame FIB (*Focused Ion Beam*) obtient une valeur de l'ordre de 0,26 (valeur théorique de $s : \sqrt{2}/4 \approx 0,35$). De même, on retrouve des valeurs de cisaillement mesurées en surface d'éprouvette du même ordre de grandeur dans les travaux réalisés par [Blackburn et Feeney \[1970\]](#) et [Oka et Taniguchi \[1980\]](#).

Le fait que ces valeurs diffèrent de la valeur théorique pourrait ainsi être le résultat d'une réorientation des lamelles induite par la présence de surfaces libres sur des lames minces. Dans le cas de [Lai et al. \[2016\]](#), cette différence est associée à la présence de phase α'' au niveau du contact du variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ avec surface libre. Dans les autres cas, cette différence est associée à la présence de maillage secondaire au sein des variants de macle primaires, venant modifier l'orientation des interfaces localement. On ne retrouve alors pas d'exemple d'un variant de macle seul débouchant sur une surface libre dans la littérature.

Notons toutefois que la manière avec laquelle le vide est introduit dans l'équation (4.27) traite de manière dissymétrique les interfaces matrice-vide et macle-vide. Cela conduit à une énergie d'interface macle-vide élevée, qui se traduit par un mouillage de la surface macle-vide par la matrice (voir [figure 4.19b](#)). Afin de s'affranchir de ce comportement, une possibilité consiste à utiliser un modèle de champ de phase dans lequel matrice et variant de macle sont chacun définis par un champ, dans l'esprit des modèles champ de phase utilisés pour la croissance de grain (voir par exemple [Fan et Chen \[1997\]](#)).

En résumé, comparativement au modèle exprimé dans le CGL, le modèle exprimé dans le CGNL permet bien de simuler la croissance anisotrope de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans des directions observées expérimentalement. Cependant, dans le cas de simulations avec des conditions aux limites périodiques, nous avons montré dans la [Section 4.3.3](#) que les macles, initialement orientées selon le plan d'habitat, se réorientent progressivement lors de leur croissance pour atteindre, quand le variant de macle atteint une taille similaire à celle de la boîte de simulation, une orientation qui dépend de la forme de la boîte de simulation. Ainsi, pour l'étude de la croissance d'un variant de macle avec des conditions aux limites périodiques, il faut soit utiliser une grande boîte de simulation, soit utiliser des formes particulières de la boîte de simulation.

Nous avons ensuite analysé la croissance d'une macle dans une simulation dans laquelle un champ auxiliaire a été ajouté au modèle de manière à reproduire la croissance d'une macle en présence de surfaces libres. Dans ce cas, nous avons montré que les plans d'habitats attendus sont bien observés, quelque soit la forme de la boîte de simulation.

4.4 Génération de germes de variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ autour d'un défaut

Jusqu'ici, l'ensemble des résultats montrés dans cette thèse ont été réalisés en considérant une fonction d'interpolation polynomiale $h(\varphi)$ d'ordre 5 (voir [équation \(2.60\)](#)) entre les champs de phase repré-

sentant les variants de macle et les données élastiques relatives à chacun d'entre eux (de la même façon que Clayton et Knap [2011a]). Dans cette section, nous allons voir comment le choix de cette fonction d'interpolation peut affecter l'apparition de germes de variants de macle par instabilité.

Un champ de phase φ est associé à un variant de macle, noté (i) , tel que $\varphi = 0$ dans la matrice et 1 dans le variant de macle. En partant de $\varphi = 0$ dans l'ensemble de la boîte de simulation, il est nécessaire d'avoir la condition suivante sur la loi d'évolution pour voir apparaître des germes de variants de macle :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -L \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi} > 0, \quad (4.30)$$

où $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{int} + \mathcal{F}_{el}$ est l'énergie libre totale du système. Le coefficient cinétique L étant pris positif, il est alors nécessaire que la force motrice $\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi} = \frac{\delta \mathcal{F}_{int}}{\delta \varphi} + \frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi}$ soit négative. Les deux termes composant cette force motrice s'écrivent :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{int}}{\delta \varphi} = W g'(\varphi) - \alpha \Delta \varphi \quad (4.31)$$

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \underline{\varepsilon}^e : h'(\varphi) \left(\underline{\lambda}^{(i)} - \underline{\lambda}^{(m)} \right) : \underline{\varepsilon}^e - h'(\varphi) \underline{S} : \left[\underline{C}^e \cdot \nabla \underline{u}^{0(i)} \cdot (\underline{F}^*)^{-1} \right], \quad (4.32)$$

où les exposants (i) concernent les termes associés au variant de macle considéré. Afin d'étudier le rôle de $h(\varphi)$ sur l'apparition de variants de macle dans la matrice, on écrit un développement limité au plus bas ordre de la force motrice lorsque φ tend vers zéro. Pour simplifier l'expression, on considère le cas de constantes élastiques isotropes, et donc homogènes $\left(\underline{\lambda}^{(i)} = \underline{\lambda}^{(m)} \right)$. On obtient alors l'expression suivante :

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi} \approx \left[2W - h''(0) \underline{S}(\varphi = 0) : \underline{\tau}^{(i)}(\varphi = 0) \right] \varphi - \alpha \Delta \varphi, \quad (4.33)$$

avec

$$\underline{\tau}^{(i)}(\varphi) = \left[\underline{C}^e(\varphi) \cdot \nabla \underline{u}^{0(i)} \cdot (\underline{F}^*(\varphi))^{-1} \right]. \quad (4.34)$$

En insérant le développement limité de l'équation (4.33) dans la loi d'évolution, et en appliquant une transformée de Fourier spatiale sur cette dernière, on peut réécrire la condition (4.30) nécessaire à l'apparition de macles dans la matrice :

$$\frac{\partial \widehat{\varphi}(\underline{q})}{\partial t} \approx w^{(i)}(\underline{q}) \widehat{\varphi}(\underline{q}) > 0, \quad (4.35)$$

avec

$$w^{(i)}(\underline{q}) = -L \left[W_{dec}^{(i)}(\underline{q}) + \alpha \underline{q}^2 \right], \quad (4.36)$$

et

$$W_{dec}^{(i)}(\underline{q}) = 2W - h''(0) \widehat{\underline{S}}(\widehat{\varphi} = 0, \underline{q}) : \widehat{\underline{\tau}}^{(i)}(\widehat{\varphi} = 0, \underline{q}). \quad (4.37)$$

Dès lors, au plus bas ordre, l'apparition de germes de variants de macle dépend du signe de $w^{(i)}(\underline{q})$. Si $W_{dec}^{(i)}(\underline{q}) \geq 0$, on a $w^{(i)}(\underline{q}) < 0$ et donc impossibilité de voir apparaître un variant de macle à partir de la matrice homogène. Une condition nécessaire à l'apparition d'un variant de macle est alors donnée par $W_{dec}^{(i)}(\underline{q}) < 0$, ce qui se traduit par l'expression suivante :

$$h''(0) \widehat{\underline{S}}(\widehat{\varphi} = 0, \underline{q}) : \widehat{\underline{\tau}}^{(i)}(\widehat{\varphi} = 0, \underline{q}) > 2W. \quad (4.38)$$

Ainsi, le choix de la fonction d'interpolation $h(\varphi)$ joue un rôle important dans l'apparition de germes de variants de macle. Cette fonction ayant pour rôle principal de stabiliser le profil du champ de phase diffus lors de la prise en compte d'une énergie élastique (voir [Chapitre 2, Section 2.3.3](#)), elle est choisie monotone, à dérivées nulles en $\varphi = 0$ et $\varphi = 1$. Précédemment, nous avons choisi une fonction polynomiale d'ordre 5, ici notée $h_5(\varphi)$, définie par :

$$\begin{aligned} h_5(\varphi) &= \varphi^3 [3\varphi(2\varphi - 5) + 10], \\ h_5(\varphi = 0) &= 0, \quad h_5(\varphi = 1) = 1, \\ h_5'(\varphi = 0) &= 0, \quad h_5'(\varphi = 1) = 0, \\ h_5''(\varphi = 0) &= 0, \quad h_5''(\varphi = 1) = 0. \end{aligned} \tag{4.39}$$

On note alors que la dérivée seconde $h_5''(\varphi = 0)$ s'annule. Ainsi, en considérant $h(\varphi) = h_5(\varphi)$, la condition (4.38) nécessaire à l'apparition de variants de macle à partir d'une matrice homogène ne peut être vérifiée. Pour prendre en compte ce phénomène, il est nécessaire de choisir une fonction d'interpolation qui, d'une part (i) permet de stabiliser le profil du champ de phase diffus et d'autre part (ii) a une dérivée seconde en $\varphi = 0$ non-nulle (et nécessairement positive pour garder le caractère monotone de l'interface matrice-macle). À la manière de [Ammar *et al.* \[2011\]](#) et [Cottura *et al.* \[2014\]](#), on utilisera dans cette section la fonction $h_3(\varphi)$, respectant ces critères, et définie par :

$$\begin{aligned} h_3(\varphi) &= \varphi^2(3 - 2\varphi), \\ h_3(\varphi = 0) &= 0, \quad h_3(\varphi = 1) = 1, \\ h_3'(\varphi = 0) &= 0, \quad h_3'(\varphi = 1) = 0, \\ h_3''(\varphi = 0) &= 6, \quad h_3''(\varphi = 1) = -6. \end{aligned} \tag{4.40}$$

Dès lors, en considérant $h(\varphi) = h_3(\varphi)$, la condition (4.38) nécessaire à l'apparition de variants de macle peut être vérifiée dans le cas où le terme $\widehat{\mathcal{S}}(\widehat{\varphi} = 0, \underline{q}) : \widehat{\mathcal{L}}^{(i)}(\widehat{\varphi} = 0, \underline{q})$ est suffisamment grand. En prenant en compte une contrainte appliquée croissante, des champs mécaniques locaux d'amplitude de plus en plus importante sont générés dans le matériau et peuvent à terme permettre de vérifier la condition (4.38).

Cependant, en partant d'un champ initialement homogène, ces instabilités s'expriment de manière homogène dans la matrice. Afin de générer une apparition locale de germes de macle, une inhomogénéité est insérée dans le système : un précipité de phase différente, une fissure, une dislocation, un joint de grain, etc ... Cette inhomogénéité permet alors de générer des champs mécaniques hétérogènes dans le système lorsqu'une contrainte/déformation extérieure est appliquée, et donc un lieu préférentiel de croissance d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Un seul cas est ici étudié pour montrer la capacité du modèle à faire apparaître des germes de variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ autour d'une inhomogénéité. On ne considère pas de surfaces libres dans ce cas. On s'intéressera à un défaut que l'on positionne dans le plan $(1\bar{1}0)$, au centre de la boîte remplie de la matrice initiale. Un champ φ^{def} lui est alors associé, portant les même constantes élastiques que la matrice (isotropes, voir [tableau 2.2](#)) et le tenseur

de déformation libre \tilde{F}^{def} suivant :

$$\tilde{F}^{def} = \begin{pmatrix} 1 & \gamma_{def} & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_{\mathcal{B}^{def}}, \quad (4.41)$$

où $\gamma_{def} = 1$, $\mathcal{B}^{def} = (\underline{e}_1^{def}, \underline{e}_2^{def}, \underline{e}_3^{def})$ est la base du repère orthonormé ayant pour vecteurs de base les vecteurs $\underline{e}_1^{def} = (1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2}, 0)$, $\underline{e}_2^{def} = (1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2}, 0)$ et $\underline{e}_3^{def} = (0, 0, 1)$. La boucle a pour dimension $24 \times 6 \times 24$ nœuds dans les directions des vecteurs de la base \mathcal{B}^{def} . Le champ φ^{def} qui lui est associé est adouci (interface diffuse) et reste constant au cours de la simulation. Douze autres champs $\varphi^{(i)}$ avec $i \in [1, 12]$, associés aux douze variants de macle, sont également introduits dans la simulation.

Une fois le défaut mis en place dans la matrice, une traction dans la direction $\underline{X} = [100]$ est appliquée sous la forme d'une rampe (temporelle). Ainsi, des champs mécaniques hétérogènes, d'amplitude croissante, sont générés au sein de la microstructure. En considérant les paramètres champ de phase présentés dans le [tableau 4.1](#), des tests préliminaires montrent que l'amplitude de traction nécessaire à l'apparition de germes de macles est de l'ordre de 20 GPa. En effet, une énergie d'interface de 4 J/m^2 implique la nécessité d'une contrainte extérieure élevée pour générer la croissance de variants de macle (affecte la valeur de W dans la condition (4.38)).

Afin de pouvoir générer des germes de macle pour des amplitudes de traction inférieure, on considère une énergie d'interface de l'ordre de 1 J/m^2 . Notons toutefois que ce choix conduira à des interfaces moins "contrôlées", s'éloignant du profil d'interface en tangente hyperbolique (voir [Chapitre 2, Section 2.3.3](#)).

Les paramètres numériques relatifs à la simulation à venir sont présentés dans le [tableau 4.6](#). Les données élastiques sont quant à elles identiques à celles présentées dans le [tableau 4.2](#).

Taille de la boîte de simulation (en nm)	$128 \times 128 \times 128$
Pas de grille d (en nm)	1
Pas de temps adimensionné \tilde{dt}	4×10^{-2}
Largeur d'interface adimensionnée $\tilde{2\delta}$	6
Pré-facteur double-puits W (en J/m^3)	4×10^9
Pré-facteur gradient α (en J/m)	$4,5 \times 10^{-9}$
Coefficient de pénalisation A_γ (en J/m^3)	12×10^9

TABLEAU 4.6 – Paramètres numériques utilisés dans la simulation de la [Section 4.4](#). L'énergie d'interface γ est ici prise égale à 1 J/m^2 .

Des tests préliminaires montrent que l'apparition de germes de macles, considérée ici lors de l'at-

teinte de la valeur 1 pour un champ de phase $\varphi^{(i)}$, a lieu pour une amplitude de traction se situant entre 7 et 8 GPa. On considère une simulation avec une contrainte appliquée $P_{11}^{app}(\tilde{t}) = 6,5 + 12,5 \times 10^{-3} \tilde{t}$ (les autres composantes de \tilde{P}^{app} sont nulles). À $\tilde{t} = 240$ (6000 pas de temps), on atteint une contrainte P_{11}^{app} de 9,5 GPa.

La [figure 4.21](#) montre l'évolution du maximum des champs $\varphi^{(i)}$, avec $i \in [1,12]$, associés à chacun des variants de macle dans le système. On voit que les champs mécaniques générés autour du défaut provoquent une sélection de variants. En effet, seuls les variants de macle 1, 2, 5, 6, 7 et 8 apparaissent par instabilité et croissent dans le système. On note également que les variants apparaissent à des temps de simulation différents : les variants 1 et 2 sont les premiers à apparaître, suivis des variants 6 et 7, et enfin des variants 5 et 8. De plus, au fur et à mesure que les variants croissent, les champs mécaniques évoluent dans le système. En conséquence, on observe la disparition des variants 6 et 7 à partir de $\tilde{t} = 200$ (5000 pas de temps).

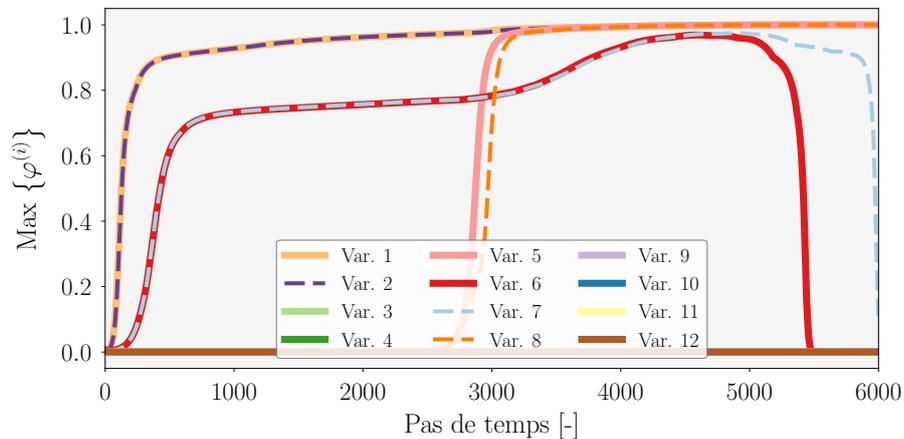


FIGURE 4.21 – Évolution temporelle de la valeur maximale des champs $\varphi^{(i)}$ dans le système.

La [figure 4.22](#) montre l'évolution des isosurfaces $\varphi^{(i)} = 0,5$ au cours de la simulation, partant d'une traction initiale de 6,5 GPa pour atteindre une valeur de 9,5 GPa en fin de simulation. Les couleurs associées à chacun des variants correspondent à celles de la légende de la [figure 4.21](#). Sur la [figure 4.22b](#), on peut voir que les variants de macle 1, 2, 6 et 7 commencent par apparaître au niveau des coins et bords de la boucle de dislocation carrée. Ces positions correspondent aux endroits où les contraintes sont maximales en début de simulation. Cela peut être observé sur la [figure 4.23](#), sur des sections des champs P_{12} et P_{23} dans le plan $(1\bar{1}0)$ de la boucle de dislocation, à $\tilde{t} = 0$. Les variants de macle 5 et 8 apparaissent quant à eux plus tardivement (voir [figure 4.22d](#)), dans les zones situées entre les variants de macle 1, 2 et la boucle de dislocation, pour y accommoder les contraintes. S'en suit une croissance de l'ensemble des variants sélectionnés, avant disparition des variants de macle 6 et 7 au profit d'une augmentation de la fraction volumique des autres variants de macle sélectionnés. La microstructure finalement atteinte est visible sur la [figure 4.22f](#) : on retrouve la morphologie en "squelette", où divers variants sous forme de lamelles se croisent et emprisonnent des cellules de matrice.

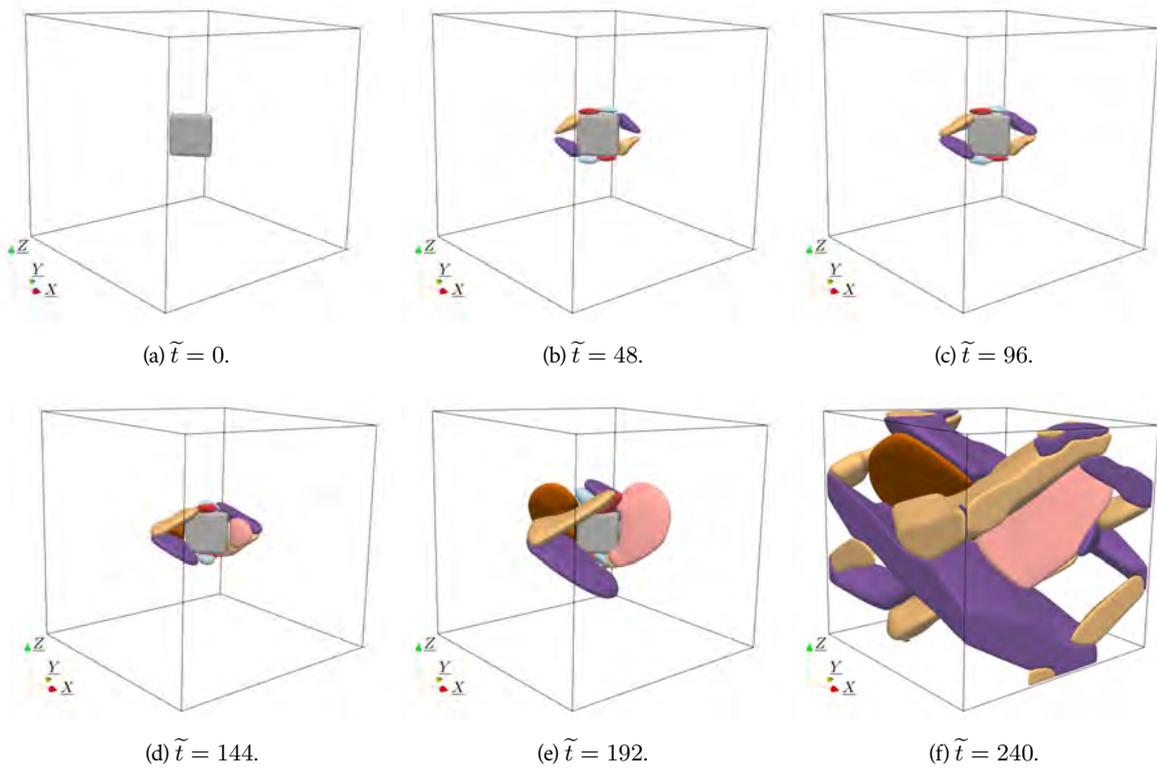
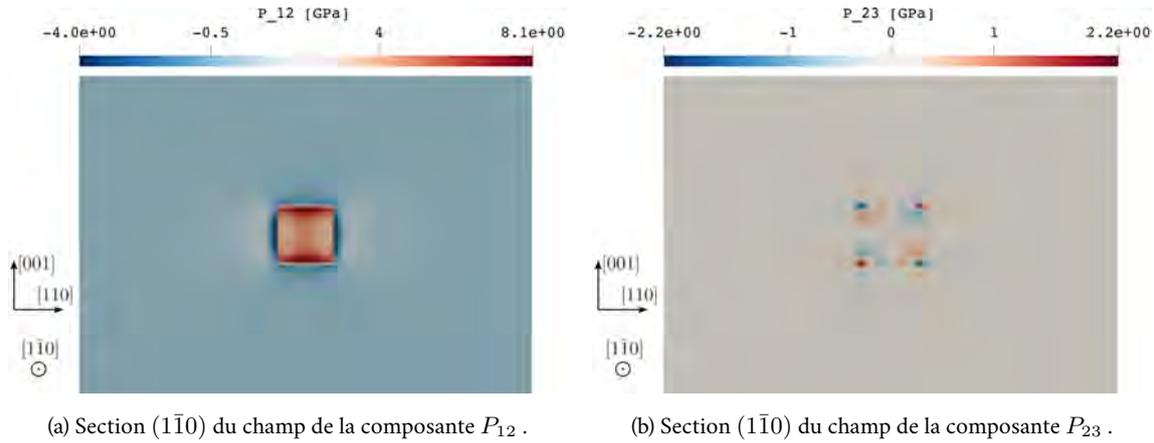


FIGURE 4.22 – Évolution des isosurfaces $\varphi^{(i)} = 0,5$ pour une contrainte appliquée $P_{11}^{app}(\tilde{t}) = 6,5 \text{ GPa} + \dot{P}_{11}^{app} \tilde{t}$, avec $\dot{P}_{11}^{app} = 12,5 \text{ MPa}/\tilde{t}$. Les couleurs utilisées pour les isosurfaces des variants correspondent aux couleurs de la figure 4.21. En gris, l'isosurface $\varphi^{def} = 0,5$ du champ associé au défaut.

Cependant, une étude des interfaces favorisées lors de la croissance des différents variants de macles sélectionnés montre que celles-ci correspondent à des interfaces de normales $\underline{K}_2^{(i)}$ pour les variants 1, 2, 5 et 8 présents en fin de simulation. Ce résultat est conforme aux résultats de la *twinning equation* (voir Section 1.3.1), où l'on avait montré qu'une interface de normale \underline{K}_1 ou \underline{K}_2 permettait d'accommoder parfaitement l'énergie élastique dans un système composé d'une macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans une matrice. Les facteurs de Schmid (SF) correspondant aux différents variants des deux systèmes de maclage ($\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ et son réciproque $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$) sont présentés dans le tableau 4.7. On voit alors que les variants observés en fin de simulation (1, 2, 5 et 8) correspondent bien aux SF les plus élevés, ceux-ci étant associés au système de maclage $\{11\bar{2}\} \langle 111 \rangle$. Le fait que l'on n'observe pas les variants 11 et 12 (même SF que 1, 2, 5 et 8) au cours de la simulation montre que les variants présents ont bénéficié d'une contrainte favorable générée par la contrainte externe et par la présence du défaut.

Il est également intéressant d'observer le comportement mécanique global de la microstructure en s'intéressant à l'évolution des valeurs moyennes des champs mécaniques au cours de l'évolution temporelle. Sur la figure 4.24, on peut voir une représentation de l'évolution de la valeur moyenne de la composante de contrainte imposée $\langle P \rangle_{11}$ et de la somme des fractions volumiques des macles $\sum_i \langle \varphi \rangle^{(i)}$ en fonction de la valeur moyenne de la composante du tenseur gradient de transformation $\langle F \rangle_{11}$. On voit alors que, lorsque $\langle P \rangle_{11}$ atteint une valeur de l'ordre de 8,75 GPa ($\tilde{t} = 192$), l'apparition de germes de macles (augmentation de la fraction volumique de macle, repère rouge sur la figure) engendre une


 FIGURE 4.23 – Cartes des contraintes à $\tilde{t} = 0$ dans le plan $(1\bar{1}0)$: (a) composante P_{12} et (b) composante P_{23} .

Variant	SF $\{332\}$	SF $\{11\bar{2}\}$	Variant	SF $\{332\}$	SF $\{11\bar{2}\}$
1	0,193	0,236	7	0,193	0,236
2	0,193	0,236	8	0,193	0,236
3	-0,386	-0,471	9	-0,386	-0,471
4	-0,386	-0,471	10	-0,386	-0,471
5	0,193	0,236	11	0,193	0,236
6	0,193	0,236	12	0,193	0,236

 TABLEAU 4.7 – Facteurs de Schmid associés aux variants des systèmes de maillage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$ et $\{11\bar{2}\}\langle 111\rangle$ (système réciproque du $\{332\}$) dans le cas de la simulation de la Section 4.4.

modification du comportement mécanique macroscopique, avec l'obtention d'une courbe de traction $P_{11}(F_{11})$ dont le comportement est similaire à ce que l'on peut observer lors de l'atteinte d'un seuil d'écoulement plastique dans le cas d'un matériau élasto-plastique.

En résumé, le cas étudié dans cette section a ainsi permis de montrer que le modèle exprimé dans le CGNL peut générer des variants de macle au bord d'un défaut. En fonction du défaut, une sélection de variants est réalisée. En perspective, dans le cadre de l'amélioration du modèle, on peut penser à l'étude plus fine du contrôle de l'épaisseur de l'interface en fonction de la valeur de l'énergie d'interface γ avec l'utilisation de la nouvelle fonction $h(\varphi)$, mais également sur l'influence du paramètre A_γ pénalisant le recouvrement des champs représentant les variants de macle dans le système.

Différents cas de défauts dans la configuration initiale peuvent également être envisagés dans ce modèle développé dans le CGNL : joints de grains entre grains d'orientations différentes, présence de pores, fissures, etc ... Cela permettrait alors de distinguer l'effet de différents types de défaut et de chargements appliqués sur l'apparition de macles $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$. Un exemple intéressant serait de considérer une plaquette de phase α'' (site réputé propice pour l'apparition de macles $\{332\}$, voir Section 1.2.2.2) initialement présente dans la matrice, et de voir l'effet de sa présence sur la sélection de de variants de macle $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$ ou $\{11\bar{2}\}\langle 111\rangle$. De manière plus générale, ce modèle pourrait permettre, à terme, d'identifier numériquement les microstructures de départ permettant de générer les microstructures

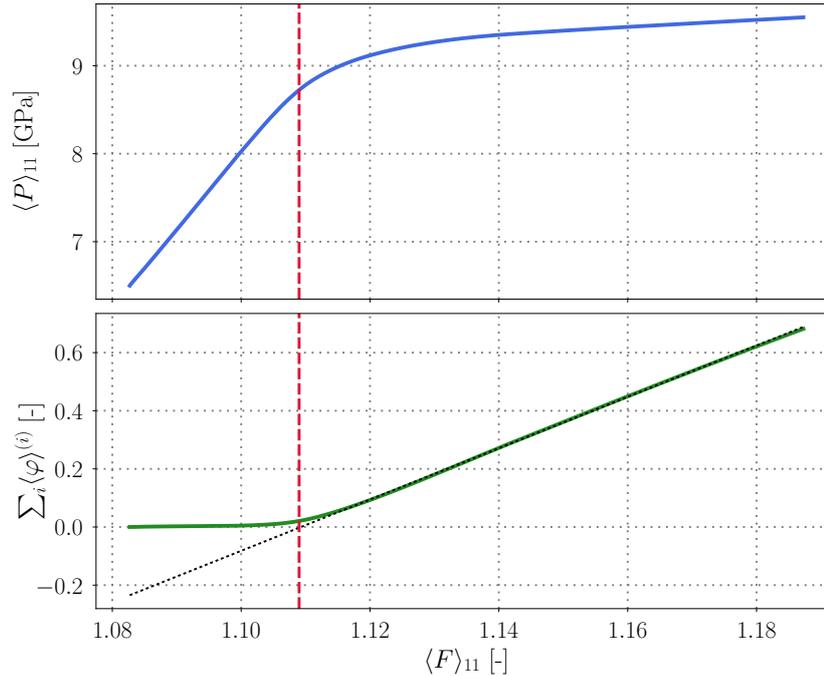


FIGURE 4.24 – Représentation de l'évolution de $\langle P \rangle_{11}$ (en bleu) et de la somme des fractions volumiques des macles (en vert) en fonction de $\langle F \rangle_{11}$. L'axe rouge repère l'augmentation importante de la fraction volumique de macles dans la simulation.

typiques observées dans le cas du maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, à l'origine de l'effet TWIP dans les alliages de titane β -métastables.

4.5 Conclusion

Au sein de ce chapitre, un modèle champ de phase appliqué au maillage mécanique $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans le cadre géométriquement non-linéaire (CGNL) avec énergie d'interface isotrope a été développé et mis en application dans différents cas.

Après mise en place du formalisme géométriquement non-linéaire dans un modèle Allen-Cahn, une comparaison des morphologies obtenues lors de la croissance d'un variant de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans le CGL et CGNL est réalisée. Une différence importante est alors mise en exergue dans le cas de l'étude de la croissance d'un germe de variant de macle pour un chargement en déformation appliquée.

Dans le cas du modèle formulé dans le CGL, les morphologies de macle obtenues sont différentes en fonction de la morphologie du germe initial. Ce phénomène est dû au fait que la minimisation de l'énergie élastique, exprimée dans le CGL, est atteinte aussi bien dans le cas où les variants de macle forment des lamelles dont l'interface est normale à la direction \underline{K}_1 que dans le cas où la normale des lamelles est la direction $\underline{\eta}_1$. Or, le cas similaire étudié dans le CGNL montre que la minimisation de l'énergie élastique exprimée dans ce formalisme est atteinte uniquement par la formation d'interfaces macle-matrice de normale \underline{K}_1 , et localement d'interfaces de normale \underline{K}_2 . Dans la nomenclature utilisée pour

décrire un mode de maillage, les plans (K_2) correspondent aux plans où les atomes ne subissent qu'une rotation lors du maillage. Ainsi, la prise en compte du CGL peut amener à une étude faussée de la croissance et de l'évolution de la morphologie des variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$.

Par la suite, un modèle capable de reproduire la croissance de plusieurs variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ au sein de la matrice initiale est développé. Il est formulé dans le CGL et le CGNL afin de montrer les différences morphologiques observées dans les microstructures finales. Après mise en place d'une méthode permettant de déterminer un chargement extérieur permettant la croissance de deux variants de macles (applicable à plus de variants), les résultats dans le CGNL ont montré l'obtention d'une microstructure en "squelette", induite par le croisement des variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ introduits dans le système. Cette microstructure en squelette, liée à la présence de macles mécaniques, est typique des observations expérimentales dans les alliages de titane β -métastable.

Cependant, en étudiant plus finement les morphologies des variants de macle obtenues, on se rend compte que les interfaces alors favorisées dans le système sont différentes de celles attendues (c.-à-d. de normales K_1 ou K_2). En effet, dans un premier temps, les variants de macle commencent par croître de manière anisotrope en favorisant la présence des interfaces attendues. Or, lorsque ceux-ci atteignent des tailles de l'ordre de la taille de la boîte, où l'effet des conditions limites périodiques sont plus importants, on note une réorientation des variants de macle. De plus, cette réorientation est variable en fonction de la forme de la boîte de simulation, empêchant alors une analyse géométrique de la microstructure finalement obtenue. Le seul cas où l'on obtient les orientations attendues correspond au cas où la boîte est dimensionnée de manière à favoriser la présence de celles-ci. Or, cette possibilité ne peut être considérée en conditions limites périodiques dans le cas où l'on considère plus d'un variant de macle, la géométrie de la boîte devenant vite complexe.

Pour pallier à ce problème, la prise en compte de surface libre est une solution qui a montré qu'il était possible de retrouver les orientations attendues.

Enfin, un premier aperçu de l'apparition de germes de variants de macles par instabilité dans un système initialement inhomogène (présence d'un défaut) a été proposé. Ce cas d'étude est permis par la modification du choix de la fonction d'interpolation $h(\varphi)$ qui aide à contrôler l'interface diffuse des champs de phase. Aussi, on note l'importance de la valeur de l'énergie d'interface, qui empêche l'apparition de germes de variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans le cas de contraintes appliquées faibles. En effet, l'effet de l'énergie d'interface est fort dans le cas de germes de faible volume et la germination nécessite alors une forte concurrence de l'énergie élastique. Une diminution de l'énergie d'interface a ainsi permis l'apparition et la croissance de variants de macle dans le système autour d'un défaut type boucle de dislocation. Ainsi, le modèle exprimé dans le CGNL permet bien de gérer l'apparition de germes de variants de macle par instabilité au sein d'un système. Cependant, il reste nécessaire d'étudier plus finement l'état de l'interface diffuse de chacun des champs de phases en fonction des valeurs de l'énergie d'interface et du paramètre de non recouvrement choisis.

Ce chapitre a ainsi permis de mettre en place un modèle champ de phase du maillage dans le CGNL, fonctionnel dans le cas d'applications de chargements extérieurs en contrainte ou déformation appli-

qué. Ce modèle a montré des résultats plus proches des observations expérimentales que ce qui était observé dans le cas des résultats obtenus dans le CGL. On appuie ainsi sur l'importance de la prise en compte d'un formalisme géométriquement non-linéaire dans le cas de l'étude de transformations displacives (type maclage) où les déformations propres introduites dans les modèles sont élevées. En effet, dans ce cas, les effets de la non-linéarité ne peuvent être négligés.

Limites du modèle et perspectives

Dans le cas où l'on considère une énergie élastique dans le CGNL, on a pu voir que les interfaces des variants de macles observés dans les microstructures finales pouvaient être normales à \underline{K}_1 (c.-à-d. plans $\{332\}$) ou à \underline{K}_2 (c.-à-d. plans $\{11\bar{2}\}$), comme prédit par la *twinning equation* (voir Section 1.3.1). En effet, dans ce modèle, l'énergie élastique ne permet pas de faire la distinction entre un mode de maclage et son conjugué (ou réciproque) : le cisaillement associé à ces deux modes de maclage sont les mêmes, à une rotation près. Comme évoqué dans la Section 1.2.3.2, considérer un potentiel énergétique rendant compte du cisaillement et du *shuffle* pourrait permettre de distinguer ces deux modes de maclage. En effet, ces deux modes nécessitent un cisaillement et un *shuffle* de même amplitudes (voir Tobe *et al.* [2014]), et aboutissent à des configurations différentes. Naturellement, on peut penser que les "chemins cinétiques" amenant la matrice initiale aux configurations obtenues par chacun de ces modes sont différents dans un paysage énergétique exprimé dans un espace à deux dimensions (cisaillement et *shuffle*). Cependant, déterminer ce paysage énergétique nécessite des calculs *ab-initio* pouvant devenir très lourds dans le cas d'alliages composés de plusieurs espèces chimiques, ce qui est souvent le cas des alliages de titane β -métastables. Il ne s'agit cependant pas d'un défi insurmontable, sachant que cette information s'avérera très intéressante à l'avenir pour comprendre les mécanismes à l'origine de la formation des macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Une fois cette information obtenue, le développement d'un modèle champ de phase basé sur ce potentiel pourrait assurer une distinction entre le mode de maclage $\{332\}$ et son conjugué du point de vue énergétique.

En revenant aux modèles champ de phase qui ont été développés dans ce chapitre, l'une des principales limites (dans le CGL ou dans le CGNL) réside dans le choix des valeurs numériques à introduire. En effet, prendre en compte une énergie d'interface de l'ordre de 4 J/m^2 est peu réaliste. Du point de vue numérique, une valeur aussi élevée semble nécessaire au bon comportement et au contrôle de l'interface du champ de phase pour les tailles de système et pour les données élastiques considérées. Or, l'ordre de grandeur de cette énergie d'interface provoque une hausse du niveau de contraintes nécessaire à la croissance de variants de macle dans le système étudié. On se retrouve alors dans l'impossibilité de comparer les champs mécaniques ou les essais mécaniques réalisés avec ceux réalisés expérimentalement, disponibles dans la littérature. Comme il est nécessaire de considérer une épaisseur d'au moins 6 nœuds sur l'interface, une solution serait de réduire l'épaisseur physique 2δ de celle-ci et donc de diminuer l'énergie qui lui est associée. Cela implique alors de raffiner la discrétisation spatiale de la boîte de simulation.

Or, si l'on veut considérer des tailles de boîte de simulation satisfaisante avec une discrétisation fine, il est nécessaire d'optimiser le code de calcul (parallélisation OMP/MPI du solveur mécanique, optimisation de la mémoire). Une seconde solution, rapidement énoncée dans le Chapitre 2, serait de

considérer la méthode S-PFM (*Sharp Phase Field Method*) permettant le mouvement d’une interface étroite, de l’ordre de 1 à 2 pas de grilles, sans générer de frottement sur réseau (Finel *et al.* [2018]).

D’autres perspectives, à court terme, peuvent également être envisagées. Du point de vue du modèle avec prise en compte de surfaces libres discuté dans la Section 4.3.3, il serait intéressant d’ajouter un champ de phase supplémentaire pour la matrice afin de considérer la même énergie d’interface pour les interfaces matrice-vide et macle-vide. Cela permettrait d’étudier ce qui se passe lorsqu’un variant de macle débouche sur la surface du matériau. Une mesure numérique des déformations en surface pourraient alors être comparées à des mesures expérimentales, et servir de référence afin de savoir si d’autres modes de déformation ont affecté la croissance des macles observées expérimentalement. Aussi, la prise en compte de surfaces libres permettrait de voir l’effet des constantes élastiques anisotropes sur la morphologie des “bords” des macles, chose qui n’a pas pu être réalisée dans la Section 4.2.4 à cause des effets des conditions limites périodiques. Enfin, il serait intéressant de lier surfaces libres et génération de germes de macles par instabilité autour d’inhomogénéités afin d’identifier les types de microstructures initiales et de chargements permettant de favoriser la croissance de variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Il serait ainsi possible, par exemple, d’évaluer la fraction volumique de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ pouvant être atteinte pour un chargement et une microstructure initiale donnés.

Un autre point important n’a pas été discuté dans ce chapitre. En effet, les différentes observations expérimentales des microstructures post-déformation montrent la présence de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ au sein de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. On parle alors de maclage secondaire. Ce phénomène de maclage secondaire apparaît notamment aux intersections des divers variants de macle, et permet d’accommoder les contraintes importantes qui peuvent se créer à ces niveaux. Or, le modèle champ de phase développé ne permet pas de prendre en compte ce type de transformations. En effet, dans notre cas, les minimums d’énergie correspondent à l’état matrice ($\varphi^{(i)} = 0$) ou aux états maclés ($\varphi^{(i)} = 1$) et seules les transformations matrice \leftrightarrow variant de macle i sont permises par la formulation en double-puits type Landau. On parle alors de transformation réversible, ou “*weak transformation*”, notamment liée à une brisure de symétrie lors d’un changement de phase (Conti et Zanzotto [2004]). Il est alors impossible de gérer les transformations de type matrice \rightarrow variant de macle \leftrightarrow variant de macle dans notre modèle, ce qui nous empêche d’envisager la possibilité de faire croître des macles au sein de macles. Il faut alors considérer un autre type de modèle, capable de prendre en compte des transformations de type “reconstructif” (au sens displacif et non pas diffusif), ayant un caractère irréversible et associées aux transformations non liées à des brisures de symétrie. C’est cet aspect qui sera abordé dans le Chapitre 5.

CHAPITRE

5

OUVERTURE SUR LA MODÉLISATION DE SYSTÈMES DE MACLAGE HIÉRARCHIQUES

Sommaire

4.1	Modèle champ de phase de type Allen-Cahn couplé à l'élasticité : cadre géométriquement non-linéaire	114
4.2	Comparaison des microstructures obtenues dans le CGL et le CGNL : modèle mono-variant	116
4.2.1	Conditions initiales	116
4.2.2	Paramètres d'entrée des modèles champ de phase avec élasticité	118
4.2.3	Conditions aux limites	118
4.2.4	Résultats et analyse	119
4.3	Développement d'un modèle champ de phase multi-variants	130
4.3.1	Mise en place du modèle multi-variants	130
4.3.2	Chargement appliqué pour la croissance de deux variants de macle	131
4.3.3	Effet des conditions limites périodiques sur les morphologies obtenues	138
4.4	Génération de germes de variants de macle $\{332\}$ $\langle 11\bar{3} \rangle$ autour d'un défaut	145
4.5	Conclusion	152

Ce chapitre a pour objectif de présenter une idée de construction d'un modèle numérique permettant de simuler la formation hiérarchique de systèmes de macles (c.-à-d. macles secondaires dans macles primaires, macles tertiaires dans macles secondaires, etc ...). Cette idée se base sur des modèles de la littérature construits dans le but de modéliser des transformations martensitiques reconstructives. Elle finalise les travaux de cette thèse en créant une ouverture sur des possibles pistes à suivre afin de simuler l'évolution de microstructures complexes observées dans les alliages de titane β -métastables sous contrainte. Ainsi, les théories présentées ne seront pas détaillées du point de vue mathématique, et on appelle les lecteurs à se référer aux différentes ressources bibliographiques citées pour plus de détails.

Dans la [Section 5.1](#), on retrouve quelques définitions en relation avec les transformations martensitiques, ainsi qu'une analogie pouvant être imaginée entre hiérarchie de maclage et transformations reconstructives. La [Section 5.2](#) présente deux modèles de la littérature relatifs aux transformations reconstructives, basés sur des approches différentes. La [Section 5.3](#) présente une possible adaptation de l'un des modèles présenté au système de maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Un modèle 1D basé sur une approche similaire est ensuite proposé pour s'assurer que certaines difficultés anticipées n'aient pas lieu lors de la résolution numérique.

5.1 Analogie entre hiérarchie de systèmes de maclage et transformation martensitique reconstructive

Les transformations martensitiques sont généralement caractérisées par un processus de transformation displacif, déformant le réseau cristallographique initial sur des temps caractéristiques beaucoup plus petits que ceux observés pour les processus de transformation induits par la diffusion d'espèces chimiques. Les transformations martensitiques reconstructives sont à l'origine de l'apparition de phases stables (ou métastables) de différentes symétries au sein du matériau.

À l'aide de la règle de Cauchy-Born ([Zanzotto \[1996\]](#), [Ericksen \[2008\]](#)), il est possible de construire un potentiel énergétique à l'échelle mésoscopique à partir d'un potentiel atomique. En effet, la règle de Cauchy-Born met en relation directe le mouvement des atomes dans un cristal avec la déformation subie par l'ensemble du cristal (*bulk*). Ainsi, une transformation martensitique peut être modélisée à l'aide d'un potentiel énergétique (non-linéaire) exprimé exclusivement en fonction des éléments du tenseur de déformation, auquel on ajoute un terme d'énergie cinétique afin de prendre en compte la propagation des ondes acoustiques ([Salman \[2009\]](#), [Salman *et al.* \[2012b\]](#), [Denoual et Vattré \[2016\]](#)).

De manière générale, on distingue les transformations martensitiques dites "faibles" (*weak*) des transformations martensitiques dites "reconstructives". Cette section met en avant les différences entre transformations faibles et reconstructives du point de vue énergétique et finit par une possible analogie entre transformations reconstructives et maclage hiérarchique.

5.1.1 Différences entre transformation martensitique "weak" et reconstructive

Les transformations martensitiques dites "faibles" (*weak*) sont associées aux transformations où les groupes de symétries de la phase parent et de la phase produit sont inclus dans un même groupe de

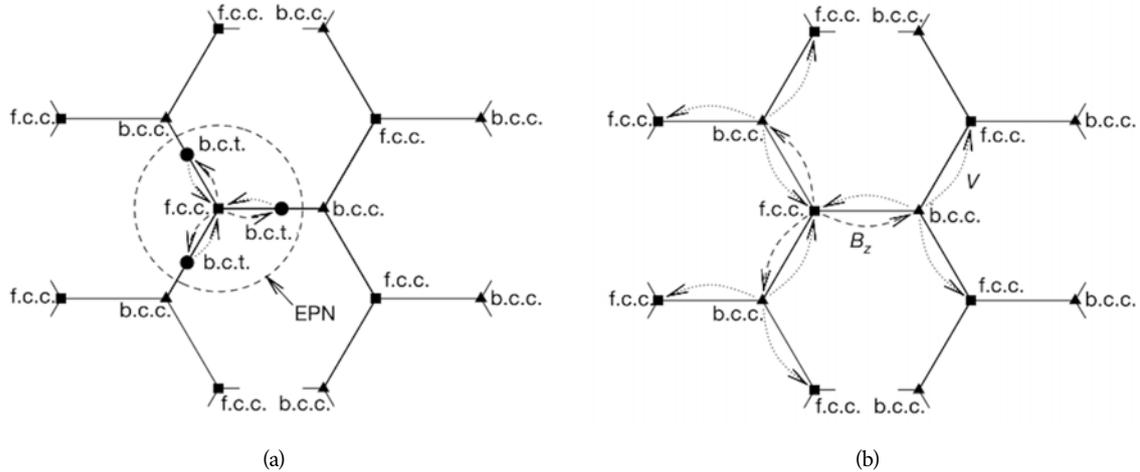


FIGURE 5.1 – Représentation schématique dans l’espace des réseaux (a) d’une transformation de type weak, amenant un réseau cubique faces centrées à un réseau tétragonal centré, et (b) d’une transformation de type reconstructive B_Z , amenant un réseau cubique faces centrées à un réseau cubique centré (Conti et Zanzotto [2004]).

symétrie fini, incluant ainsi les brisures de symétrie. Toutes les autres transformations sont associées au type reconstructif (Ericksen [1989], Bhattacharya *et al.* [2004]). Bhattacharya *et al.* [2004] relie les transformations martensitiques faibles aux transformations de phase réversibles (du point de vue de la microstructure), à l’origine de l’effet mémoire de certains alliages (*shape memory alloys*). Les transformations reconstructives sont quant à elles associées à des transformations irréversibles.

On s’intéresse aux différences entre ces deux types de transformation du point de vue énergétique. Pour cela, il est intéressant de définir la densité d’énergie libre ϕ d’un cristal, uniquement fonction de la base $(\underline{e}_i; i = 1, 3)$ utilisée pour reconstruire, par translation, le réseau en question (à une température donnée). Cette densité d’énergie doit alors être invariante par toute transformation incluse dans le groupe de symétrie global des réseaux de Bravais, c’est-à-dire le groupe unimodulaire $GL(3, \mathbb{Z})$, constitué des matrices 3×3 à coefficients dans \mathbb{Z} et dont le déterminant est égal à ± 1 , puisque le réseau construit avec la base $(\bar{\underline{e}}_j = m_{ij} \underline{e}_i; j = 1, 3)$ est identique à celui construit à partir de la base $(\underline{e}_i; i = 1, 3)$ pour toute opération de symétrie $\underline{m} = (m_{ij})$ appartenant au groupe $GL(3, \mathbb{Z})$. Le groupe $GL(3, \mathbb{Z})$ contient les opérations de rotation, de réflexion, de cisaillement n’induisant pas de modification du réseau (*lattice-invariant shear*), et toutes les combinaisons de ces opérations. Le potentiel ϕ étant invariant par application d’une opération du groupe $GL(3, \mathbb{Z})$, il est constitué d’un paysage énergétique non borné dans l’espace des déformations, et contenant une infinité de puits de potentiel.

Dans le cas des transformations martensitiques faibles, l’invariance du potentiel ϕ peut être limitée à un sous-groupe fini de $GL(3, \mathbb{Z})$ associé à la relation groupe/sous-groupe de la transformation. Ainsi, dans le paysage énergétique exprimé dans l’espace des déformations, on peut se limiter à un voisinage autour d’un état de référence (réseau initial) contenant un nombre fini de puits de potentiel. Ce voisinage ne contient pas de transformations de type *lattice-invariant shear*. Ces domaines bornés sont nommés les EPNs (*Ericksen-Pitteri Neighbourhoods*, Conti et Zanzotto [2004]). Afin d’illustrer ces

propos, [Conti et Zanzotto \[2004\]](#) propose une représentation schématique dans l'espace des réseaux de Bravais d'une transformation martensitique faible partant d'un réseau initial cubique faces centrées et ayant pour produit un réseau tétragonal centré (b.c.t. pour *body-centered tetragonal*) (voir [figure 5.1a](#)). On voit alors qu'un réseau c.f.c. initial peut mener à trois variants b.c.t. différents. Seules les transformations représentées par des flèches sont possibles. Dans le cas de ces transformations, où le paysage énergétique peut être limité à un nombre fini de puits, il est immédiat de développer une théorie de type Landau basée sur une formulation non-linéaire de l'énergie élastique en fonction des composantes du tenseur droit de Cauchy-Green \mathcal{C} .

Dans le cas de transformations reconstructives, la symétrie diminue au cours de la transformation, pour ensuite augmenter afin d'atteindre l'état final. Il n'existe alors pas d'EPN fini contenant l'ensemble des transformations possibles. En conséquence, nous ne pouvons plus nous contenter de construire un potentiel ϕ en limitant ses invariances à un sous-groupe fini de $GL(3, \mathbb{Z})$. Il n'est alors pas possible d'appliquer la théorie classique de type Landau pour modéliser le potentiel ϕ dans l'espace des déformations. La [figure 5.1b](#) illustre ces propos à l'aide de la transformation B_Z (de Bain) amenant un réseau cubique faces centrées (c.f.c.) à un réseau cubique centré (c.c.). La transformation inverse c.c. à c.f.c. peut mener à trois variants différents de réseau cubique faces centrées. Ainsi, un enchaînement de transformations de ce type peut mener loin du voisinage de l'état initial, contrairement au cas des transformations dites faibles.

5.1.2 Analogie avec hiérarchie des systèmes de maclage

Dans les alliages de titane β -métastables, un maclage mécanique hiérarchique est observé. En effet, on observe la présence de systèmes de maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ secondaires, c.-à-d. en relation de macle avec le réseau c.c. obtenu suite à un maclage primaire $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. On peut alors imaginer un arbre de transformation similaire à celui présenté dans la [figure 5.1b](#). Une représentation schématique de cet arbre de transformation est présentée sur la [figure 5.2](#).

Dans ce cas, on voit qu'un EPN ne peut être défini. Il n'y a alors pas de possibilité de limiter l'invariance du potentiel énergétique ϕ à des transformations définissant un sous-groupe du groupe de symétrie global $GL(3, \mathbb{Z})$.

Dès lors, il est nécessaire de construire un potentiel ϕ capable de rendre compte des différentes transformations observées dans le matériau. La prochaine section présente brièvement deux modèles où le paysage énergétique est construit pour des transformations martensitiques reconstructives.

5.2 Modélisation des transformations de phase reconstructives

Deux modèles de transformations martensitiques reconstructives seront brièvement présentés dans cette section. Ces deux modèles sont basés sur la construction d'un paysage énergétique dans l'espace des déformations (\underline{F}), ou dans l'espace des métriques ($\mathcal{C} = \underline{F}^T \cdot \underline{F}$).

Le premier modèle est celui proposé par [Denoual et Vattré \[2016\]](#). Il est basé sur une approche

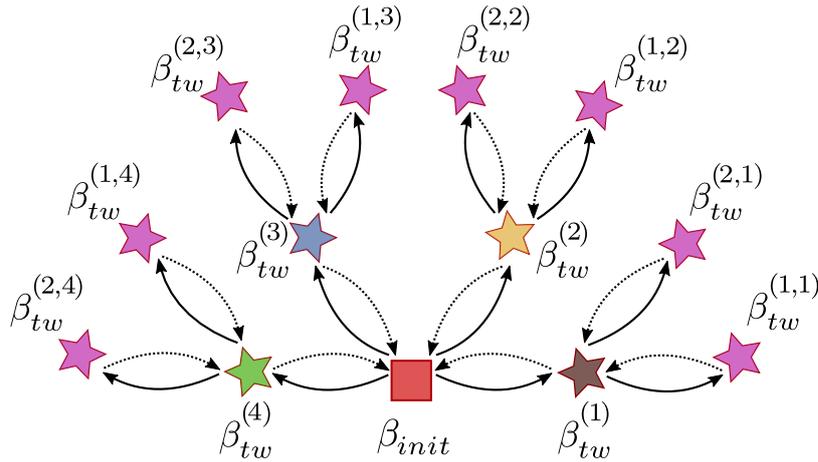


FIGURE 5.2 – Représentation schématique d’un arbre de transformation dans le cas du maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. En rouge, le réseau c.c. initial. Quatre variants de macle primaires sont représentés, issus du réseau initial (étoiles de couleurs différentes). De ces quatres variants découlent des variants de macle secondaires (étoiles roses). Les flèches pleines correspondent aux transformations directes; en pointillés aux transformations inverses.

champ de phase avec un potentiel basé sur des chemins de réaction (*reaction pathways*). Cette méthode nécessite la mise en place d’un arbre de transformation, construit par une duplication récursive d’un seul chemin de transformation martensitique reconstructive. Cette duplication se base sur les symétries du réseau et les rotations incluses dans les groupes ponctuels de symétrie de chacune des phases stables du système.

Un exemple d’arbre de transformation est donné sur la [figure 5.3](#) dans le cas de la transformation reconstructive 2D entre un réseau carré et un réseau hexagonal. Les nœuds de l’arbre représentent alors les phases stables ou métastables, et les lignes reliant ces connexions correspondent aux chemins de réaction. En se basant sur cet arbre de transformations, [Denoual et Vattré \[2016\]](#) construisent un potentiel dans l’espace des métriques qui utilise comme support cet arbre de chemins de réaction. Les nœuds de l’arbre sont ainsi associés à des minima d’énergie. Les chemins correspondent quant à eux aux chemins de moindre énergie entre les différentes phases. Ce modèle est ainsi capable de générer une hiérarchie de transformations de phases. Il est cependant limité par la profondeur de l’arbre initialement construit.

Dans le reste du chapitre, on s’intéresse à un second modèle de transformations martensitiques reconstructives. Ce modèle est proposé par [Conti et Zanzotto \[2004\]](#) et se base sur les différents travaux concernant la réduction des formes quadratiques ([Charve \[1880\]](#), [Engel \[1986\]](#), [Sternberg \[1995\]](#)), c.-à-d. dans notre cas les métriques \mathcal{C} ($\mathcal{C} = \tilde{F}^T \cdot \tilde{F}$). La réduction des formes quadratiques permet, dans le domaine de la cristallographie, de savoir si deux réseaux définis par des vecteurs de bases différents correspondent à un même réseau.

Une métrique \mathcal{C} rend compte de l’état de déformation d’un réseau cristallographique. Elle est définie à partir des vecteurs ($\underline{e}_i; i = 1,3$) qui constituent la base utilisée pour construire le réseau :

$$C_{ij} = \underline{e}_i \cdot \underline{e}_j. \quad (5.1)$$

Ainsi, en 2D, le réseau carré peut être défini par les vecteurs de base $\underline{e}_1 = (1,0)$ et $\underline{e}_2 = (0,1)$. La

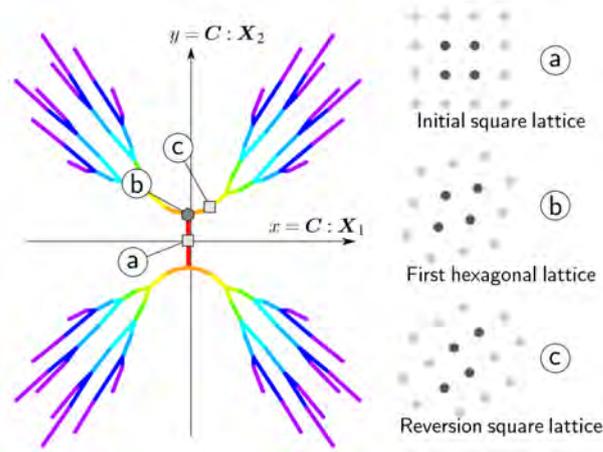


FIGURE 5.3 – Représentation 2D de l'arbre des chemins de transformation (5 cycles) dans le cas de la transformation reconstructive carré-hexagonal. Les axes x et y correspondent à une projection des métriques sur une base de projection X_i (Denoual et Vattré [2016]).

métrique \mathcal{Q}_{init} alors associée à cette base est le tenseur identité \mathbb{I} :

$$\mathcal{Q}_{init} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

En imposant un cisaillement simple à ce réseau via l'application du tenseur $\mathcal{F} = \mathbb{I} + (e_1 \otimes e_2)$, on obtient un réseau ayant pour vecteurs de base $e'_1 = \mathcal{F} \cdot e_1 = (1,0)$ et $e'_2 = \mathcal{F} \cdot e_2 = (1,1)$. La métrique \mathcal{Q}_{def} associée à cette nouvelle base est obtenue à l'aide de l'équation (5.1) :

$$\mathcal{Q}_{def} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

En fait, les deux bases étant reliées par la transformation \mathcal{F} , les métriques \mathcal{Q}_{init} et \mathcal{Q}_{def} doivent être reliées par l'équation suivante :

$$\mathcal{Q}_{def} = \mathcal{F}^T \cdot \mathcal{Q}_{init} \cdot \mathcal{F}, \quad (5.4)$$

ce que l'on vérifie immédiatement à l'aide de la forme matricielle de \mathcal{F} :

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Dans le cas présent, \mathcal{F} appartient au groupe $GL(2, \mathbb{Z})$ des matrices 2x2 unimodulaires (nous considérons ici un réseau à deux dimensions). Les métriques \mathcal{Q}_{init} et \mathcal{Q}_{def} sont donc associées au même réseau et doivent donc correspondre à la même énergie libre.

En se basant sur ces relations entre métriques relatives au même réseau, il est intéressant de définir une métrique unique représentative du réseau en question. En considérant l'ensemble \mathcal{L}_2^+ des formes quadratiques définies positives (ensemble des métriques \mathcal{Q}) dans l'espace 2D, rechercher une métrique unique représentative de métriques définies dans \mathcal{L}_2^+ revient à définir un domaine réduit de l'ensemble \mathcal{L}_2^+ . Ce domaine réduit, noté \mathcal{D} , est défini comme l'ensemble des métriques uniques représentatives de

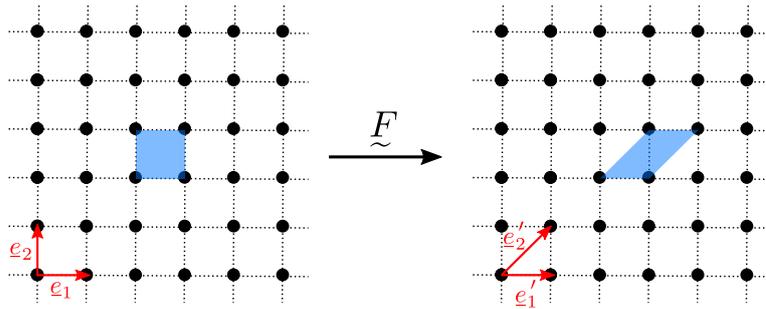


FIGURE 5.4 – Représentation d'un réseau carré avant et après avoir subi une transformation F . Les vecteurs de base des réseaux sont tracés en rouge. En bleu, un élément carré du réseau initial subissant la transformation F .

différents réseaux : toute application de l'équation (5.4) sur des métriques de \mathcal{L}_2^+ ne permet d'obtenir qu'une seule métrique dans l'ensemble \mathcal{D} . Ainsi, pour chacun des réseaux de Bravais, on retrouve une métrique unique dans le domaine réduit \mathcal{D} , aussi appelé domaine fondamental. Cette notion de réduction de l'espace des métriques à un domaine fondamental a été étudiée plus généralement dans le cadre de l'étude de la réduction des formes quadratiques par De Lagrange [1773], Lejeune Dirichlet [1850], ou encore Seeber [1831]. En reprenant les travaux de ces derniers, Engel [1986] propose une définition du domaine fondamental \mathcal{D} en 2D :

$$\mathcal{D} = \left\{ \mathcal{Q} \in \mathcal{L}_2^+ \mid 0 < C_{11} \leq C_{22}, 0 \leq C_{12} \leq \frac{C_{11}}{2} \right\}. \quad (5.6)$$

Les métriques appartenant à \mathcal{D} sont dites de la forme réduite de Lagrange. Le domaine fondamental \mathcal{D} et ses copies en relation de symétrie $\mathfrak{m}^T \mathcal{D} \mathfrak{m}$, $\mathfrak{m} \in GL(2, \mathbb{Z})$, remplissent alors entièrement l'espace \mathcal{L}_2^+ .

Engel [1986] propose un algorithme afin de construire la métrique réduite appartenant à \mathcal{D} à partir de n'importe quelle métrique de \mathcal{L}_2^+ . Il est alors possible, pour une métrique $\mathcal{Q} \in \mathcal{L}_2^+$ donnée, de déterminer une métrique réduite $\mathcal{Q}^{red} \in \mathcal{D}$ associée, et la matrice $\mathfrak{m} \in GL(2, \mathbb{Z})$, telles que :

$$\mathcal{Q}^{red} = \mathfrak{m}^T \cdot \mathcal{Q} \cdot \mathfrak{m}. \quad (5.7)$$

Nous avons rappelé plus haut que si \mathfrak{m} est une matrice unimodulaire, les métriques \mathcal{Q} et $\mathfrak{m}^T \cdot \mathcal{Q} \cdot \mathfrak{m}$ sont associées au même réseau. L'énergie libre ϕ doit donc vérifier :

$$\forall \mathcal{Q} \in \mathcal{L}_2^+, \forall \mathfrak{m} \in GL(2, \mathbb{Z}) : \phi(\mathcal{Q}) = \phi(\mathfrak{m}^T \cdot \mathcal{Q} \cdot \mathfrak{m}). \quad (5.8)$$

Une manière simple de construire un potentiel ϕ qui vérifie ces invariances est de le définir de la manière suivante :

$$\forall \mathcal{Q} \in \mathcal{L}_2^+ : \phi(\mathcal{Q}) = \phi_0(\mathcal{Q}^{red}), \quad (5.9)$$

où le potentiel ϕ_0 n'est défini que dans le domaine fondamental \mathcal{D} et \mathcal{Q}^{red} est une métrique réduite associée à \mathcal{Q} .

Il est ainsi possible de se limiter à la construction d'un potentiel élastique non-linéaire ϕ_0 dans le domaine fondamental \mathcal{D} , construit de manière à ce qu'il présente des minima pour les métriques associées aux symétries cristallines impliquées dans les transformations de phase que l'on souhaite considérer

(par ex. puits de potentiel sur les métriques réduites du réseau carré et du réseau hexagonal dans le cas de la transformation reconstructive 2D carré-hexagonal). Ce potentiel pourrait être écrit sous une forme polynomiale, fonction des composantes des métriques réduites (\mathcal{Q}^{red}). Pour plus d'informations au sujet de la construction du potentiel élastique non-linéaire dans un domaine fondamental, on redirige le lecteur vers les travaux de [Conti et Zanzotto \[2004\]](#), [Bhattacharya et al. \[2004\]](#), [Baggio et al. \[2019\]](#) ou encore [Salman et Baggio \[2019\]](#), où des potentiels relatifs à la transformation reconstructive carré-hexagonal sont proposés.

5.3 Application au système de maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$

Dans la section précédente, les modèles présentés ont été réalisés dans le cadre de l'étude des transformations martensitiques reconstructives. L'analogie entre ces transformations et les modes de maclages hiérarchiques évoquée dans la [Section 5.1](#) permet d'envisager l'utilisation de ce type de modèles pour chercher à modéliser le comportement d'un matériau subissant du maclage hiérarchique. Dans cette section, on s'intéressera à la possibilité d'appliquer le modèle de [Conti et Zanzotto \[2004\]](#) dans ce cas.

Dans le cas du maclage mécanique, le réseau initial subit un cisaillement permettant l'obtention d'un réseau final identique, en relation de macle avec le réseau parent. Pour revenir aux alliages de titane β -métastables, nous considérons un réseau initial cubique centré (c.c.). En partant de ce réseau, l'application de l'opération de cisaillement nécessaire au maclage de type $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ permet d'obtenir un réseau maclé de même structure cristallographique que le réseau parent. Du point de vue des métriques, le réseau maclé obtenu possède une métrique liée à celle du réseau initial par une opération de type *lattice invariant shear* : les réseaux initial et maclé ont une même métrique réduite relative au réseau cubique centré.

Cependant, dans le cas du maclage de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, le cisaillement simple qui lui est associé ne permet d'amener que la moitié des sites atomiques dans la bonne configuration de macle (voir [Section 1.2.3.3](#)) : il y a nécessité d'un *shuffle* pour reconstruire le réseau cubique centré. Ainsi, la métrique obtenue suite à l'application du cisaillement nécessaire au maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ ne se réduit pas à une métrique semblable à celle du réseau cubique centré.

5.3.1 Validité de la loi de Cauchy-Born

Cette différence réside également dans l'application de la loi de Cauchy-Born. Cette loi permet de connecter une description atomique (réseaux cristallins) d'un mode de déformation à une description à l'échelle du continuum. À titre d'exemple, on considère un réseau de référence composé d'une base de vecteurs \underline{e}_a , $a \in [1,3]$, et un continuum représentant un cristal composé de ce réseau. La loi de Cauchy-Born déclare que les vecteurs de base du réseau sont considérés comme des vecteurs matériels : si une déformation macroscopique est appliquée au continuum, les vecteurs $(\underline{e}_a; a = 1,3)$ d'une base du réseau initial se transforment également selon la déformation \underline{F} . En d'autres termes, les vecteurs \underline{e}_b

définis par :

$$\underline{e}_b = \underline{F} \cdot \underline{e}_a \quad (5.10)$$

constituent une base possible pour le réseau déformé. Dans le cas du maclage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$, les vecteurs de base \underline{e}_b obtenus par l'application du cisaillement associé au mode de maclage ne constituent pas une base du réseau maclé, car le cisaillement doit être accompagné d'un *shuffle* pour finaliser le maclage : la loi de Cauchy-Born est violée. Or, quand elle est valide, cette loi permet de construire une densité d'énergie libre $\tilde{\phi}$ d'un cristal vu comme un continuum à partir de la densité d'énergie libre ϕ_{at} , définie à l'échelle atomique, de la manière suivante :

$$\tilde{\phi}(\underline{F}) = \phi(\underline{F} \cdot \underline{e}_a) = \phi(\underline{e}_b). \quad (5.11)$$

Dans cette situation, la densité d'énergie élastique du continuum est une fonctionnelle du gradient de transformation \underline{F} (plus précisément de la métrique \underline{C}) et nous pouvons envisager une théorie élastique (non-linéaire) pour formuler cette densité d'énergie.

Une forme faible de la loi de Cauchy-Born peut cependant être établie quand il existe un sous-réseau du réseau de référence, identique pour toutes les transformations de maclage, qui, après chacune de ces transformations, génère un sous-réseau du réseau final (Zanzotto [1996]). Nous avons alors tenté d'identifier un sous-réseau du réseau c.c. initial qui vérifierait le critère précédent. Dans ce but, nous avons essayé d'identifier un sous-réseau cubique simple.

L'application de l'opération de cisaillement associée au mode de maclage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$ du réseau cubique centré, avec une amplitude de cisaillement $s = \sqrt{2}/4$, sur le réseau cubique simple ne permet pas d'obtenir un réseau en relation de macle avec le réseau parent. Cependant, en modifiant l'amplitude du cisaillement et en la prenant égale à $3\sqrt{2}$, une relation de macle avec un sous-réseau du produit final est obtenue pour chacun des 12 variants de macle. Nous sommes donc dans les conditions d'application d'une forme faible de la loi de Cauchy-Born : la densité d'énergie libre peut donc être formulée dans le cadre d'une théorie élastique non-linéaire.

Dès lors que l'on a identifié un réseau possiblement candidat nous permettant de construire un potentiel élastique non-linéaire relatif au maclage $\{332\}\langle 11\bar{3}\rangle$, on s'interroge maintenant sur la mise en place d'un domaine fondamental \mathcal{D} en 3D, qui nous permettrait d'appliquer la procédure proposée par Conti et Zanzotto [2004] dans le cas des transformations martensitiques reconstructives. Le potentiel énergétique ne serait alors défini que dans ce domaine, avec un puits de potentiel unique associé au réseau cubique simple. La construction explicite de ce potentiel, ingrédient essentiel du modèle, sera l'objet de travaux ultérieurs. Nous avons cependant exploré ici les aspects numériques qu'il faut maîtriser pour exploiter numériquement ce type de modèle.

5.3.2 Algorithme de réduction des métriques en 3D

Un ingrédient tout aussi important a pu ainsi être implémenté et testé : l'algorithme permettant d'effectuer l'opération de réduction, permettant de relier une métrique quelconque de \mathcal{L}_3^+ (3D cette fois) à sa métrique réduite dans un domaine fondamental défini en 3D. On doit cet algorithme à Krivý et Gruber [1976], avec une extension proposée par Grosse-Kunstleve *et al.* [2004] permettant de générer à la fois la métrique réduite, et les matrices unimodulaires $\underline{m} \in GL(3, \mathbb{Z})$ associées à ces réductions

(voir équation (5.7)). On retrouve dans ces travaux la dénomination “cellules de Niggli” lorsque l’on parle de métriques réduites. Cette dénomination est liée aux travaux de Niggli [1928] qui a défini un ensemble de conditions algébriques menant au choix d’une base unique (métrique réduite) pour un réseau cristallographique donné, constituant les conditions à remplir pour qu’une métrique se trouve au sein d’un domaine fondamental 3D. Les travaux de Niggli se sont basés sur les conditions de réduction des formes quadratiques en 3D élaborées par Seeber [1831].

Cet algorithme a été testé et validé sur des cas basiques 2D (tel que celui présenté en début de Section 5.2) mais également sur le maillage $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$. Dans ce dernier cas, on obtient bien une métrique réduite identique dans le cas de la prise en compte d’un réseau initial c.c. et d’un réseau c.c. ayant subi le cisaillement intrinsèque au mode de maillage $\{112\} \langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$.

L’application du cisaillement $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ sur le réseau c.c. ne permet pas d’obtenir une métrique réduite associée au réseau c.c., conformément à ce que nous expliquions ci-dessus.

Enfin, un test concernant le sous-réseau cubique simple a bien permis de valider l’obtention d’une même métrique réduite dans le cas d’un maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ de cisaillement $s = 3\sqrt{2}$.

Avant de penser à construire le potentiel 3D, une interrogation a été soulevée concernant le comportement du potentiel lorsqu’il atteint le bord du domaine fondamental. D’après Conti et Zanzotto [2004], des conditions de bord complexes doivent être prises en compte afin de s’assurer que le potentiel est en tout point deux fois dérivables, cette condition semblant nécessaire pour intégrer numériquement les équations d’évolution associées au potentiel. Comme il est difficile de construire un potentiel qui vérifie ces conditions de continuité jusqu’aux bords du domaine fondamental, nous avons voulu vérifier si ces conditions sont vraiment nécessaires. Dans ce but, nous nous sommes intéressés à un problème simplifié, formulé à 1D. C’est l’objet de la section suivante.

5.4 Étude d’un problème simplifié en 1D

Dans cette section, on étudie le comportement d’un système mécanique 1D composé de N nœuds, reliés entre eux par $N - 1$ ressorts de raideurs K_n , $n \in [0, N - 2]$. Des conditions aux limites périodiques seront appliquées à ce système, de type contraintes appliquées. On associe alors à chaque nœud un degré de liberté δu_n (fluctuation de déplacement) et entre chaque nœud une déformation totale $\varepsilon_n = \delta \varepsilon_n + \langle \varepsilon \rangle$, où $\langle \varepsilon \rangle$ correspond à la déformation totale moyenne et $\delta \varepsilon_n = \delta u_{n+1} - \delta u_n$ correspond au terme de fluctuation locale des déformations.

5.4.1 Présentation du modèle

On imagine à présent que chaque ressort est régi par une énergie élastique f_{el} telle que représentée sur la figure 5.5a. Il s’agit d’un potentiel fonction de la déformation ε_n , composé d’une infinité de fonctions quadratiques, continues par morceaux, créant une infinité d’états stables pour $\varepsilon_n \in \mathbb{Z}$.

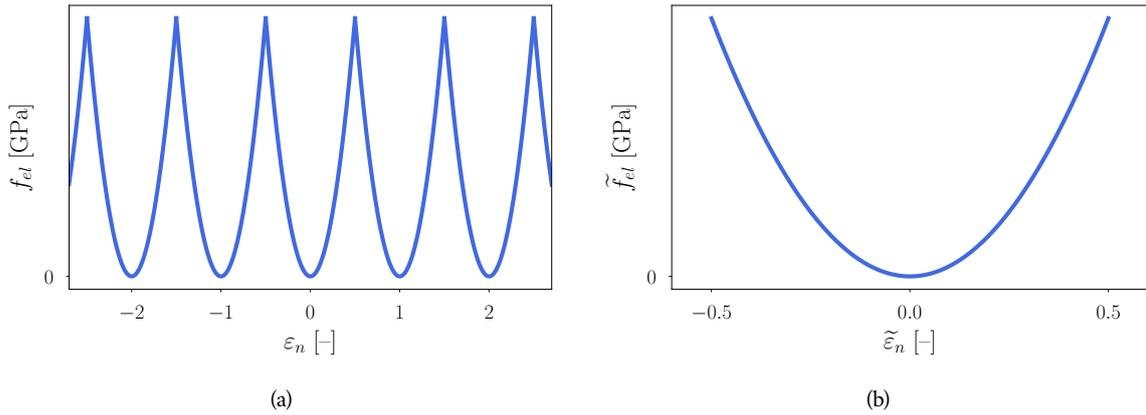


FIGURE 5.5 – Représentation de l'énergie élastique en fonction de la déformation associée à un ressort : (a) dans l'espace des déformations, (b) dans un domaine limité de l'espace des déformations ("domaine fondamental").

Il s'agit d'une représentation simplifiée en 1D d'une transformation hiérarchique dans l'espace des déformations : passer dans le puits $\varepsilon_n = 2$ nécessite le passage par le puits $\varepsilon_n = 1$, etc ... Pour tenter d'appliquer le concept du modèle de [Conti et Zanzotto \[2004\]](#) à ce problème, on se limite à un domaine fondamental \mathcal{D} dans l'espace des déformations défini par :

$$\mathcal{D} = \{\varepsilon_n \in \mathbb{R} \mid -1/2 \leq \varepsilon_n < 1/2\}. \quad (5.12)$$

On note que le potentiel défini ci-dessus n'est donc pas dérivable au bord du domaine fondamental. On définit une "déformation réduite" $\tilde{\varepsilon}_n = \varepsilon_n - p_n$ avec $p_n \in \mathbb{Z}$ une variable permettant de suivre le nombre de fois où l'on revient dans le domaine fondamental en cours de déformation. Cette dernière est alors équivalente à la matrice unimodulaire $\tilde{\eta}$ de l'équation (5.7). De la même façon que cette matrice $\tilde{\eta}$ dans le cas des algorithmes de réduction cités dans la [Section 5.3](#), la variable p_n évolue lorsque des conditions de réduction sont réunies. Ici, ces conditions se résument à :

- Si $\tilde{\varepsilon}_n < 1/2$, alors $p_n = p_n - 1$.
- Si $\tilde{\varepsilon}_n \geq 1/2$, alors $p_n = p_n + 1$.

Dans le domaine fondamental \mathcal{D} , l'énergie élastique \tilde{f}_{el} y est exprimée sous la forme d'une seule parabole en fonction de $\tilde{\varepsilon}_n$, centrée en $\tilde{\varepsilon}_n = 0$ (voir [figure 5.5b](#)). Dès lors, l'énergie élastique totale \mathcal{F} du système composé de $N - 1$ ressorts sur lequel on applique une contrainte moyenne σ^{app} peut être écrite sous la forme d'une somme sur les ressorts de potentiels réduits \tilde{f}_{el} :

$$\mathcal{F} = \sum_{n=0}^{N-2} \tilde{f}_{el}^{(n)} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-2} K_n (\delta\varepsilon_n + \langle \varepsilon \rangle - p_n)^2 - (N - 1) \sigma^{app} \langle \varepsilon \rangle, \quad (5.13)$$

qui peut également s'écrire en fonction des δu_n :

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-2} K_n (\delta u_{n+1} - \delta u_n + \langle \varepsilon \rangle - p_n)^2 - (N - 1) \sigma^{app} \langle \varepsilon \rangle. \quad (5.14)$$

Le système est alors à l'équilibre lorsque les variables $(\delta u)_n$ et $\langle \varepsilon \rangle$ respectent les conditions d'équilibre

suivantes :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial (\delta u)_n} = 0, \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \langle \varepsilon \rangle} = 0. \quad (5.16)$$

5.4.2 Résolution de l'équilibre mécanique

L'équation (5.15) peut être résolue à l'aide d'une méthode de dissipation en considérant l'équation type Allen-Cahn suivante :

$$\frac{\partial (\delta u)_n}{\partial t} = -L \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial (\delta u)_n}, \quad (5.17)$$

où $L > 0$ est un coefficient cinétique. En écrivant $K_n = K_0 - (\delta K)_n$, avec $K_0 = \langle K_n \rangle$, l'équation (5.15) permet d'obtenir l'écriture du schéma temporel semi-implicite suivant :

$$\begin{aligned} \delta u_n(t + dt) = & \delta u_n(t) + A_n(t) \\ & + L dt K_0 [\delta u_{n-1}(t + dt) - 2\delta u_n(t + dt) + \delta u_{n+1}(t + dt) \\ & + p_{n-1}(t) - p_n(t)], \end{aligned} \quad (5.18)$$

avec

$$\begin{aligned} A_n(t) = & -L dt \{ \delta K_{n-1} [\delta u_n(t) - \delta u_{n-1}(t) - p_{n-1}(t)] \\ & + \delta K_n [\delta u_n(t) - \delta u_{n+1}(t) + p_n(t)] \}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

On cherche à résoudre le problème dans l'espace de Fourier. En considérant q la composante du vecteur d'onde 1D associé à la position d'un nœud du système étudié, la transformée de Fourier discrète $\widehat{\delta u}(q)$ est définie par :

$$\widehat{\delta u}(q) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (\delta u)_n e^{-iqn}, \quad (5.20)$$

et la transformée de Fourier inverse par :

$$(\delta u)_n = \sum_q \widehat{\delta u}(q) e^{iqn}. \quad (5.21)$$

Deux opérateurs sont également définis afin de faciliter l'écriture de la transformée de Fourier de l'équation (5.18). Ces deux opérateurs sont liés à la transformée de Fourier des opérateurs de type gradient ($s(q)$) et laplacien ($s_2(q)$) discrets en 1D :

$$s(q) = -1 + e^{-iq}, \quad (5.22)$$

$$s_2(q) = s(q) s^*(q), \quad \text{avec} \quad s^*(q) = -1 + e^{iq}. \quad (5.23)$$

Dès lors, la transformée de Fourier de l'équation (5.18) s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \widehat{\delta u}(q, t + dt) = & \widehat{\delta u}(q, t) + \widehat{A}(q, t) \\ & + L dt K_0 [s_2(q) \widehat{\delta u}(q, t + dt) + s(q) \widehat{p}(q, t)], \end{aligned} \quad (5.24)$$

qui permet alors d'exprimer facilement $\widehat{\delta u}(q, t + dt)$ à l'aide de l'équation suivante :

$$\widehat{\delta u}(q, t + dt) = \frac{\widehat{\delta u}(q, t) + L dt \left(K_0 s(q) \widehat{p}(q, t) - \widehat{A}(q, t) \right)}{1 + L dt K_0 s_2(q)}, \quad (5.25)$$

où le calcul de $\widehat{A}(q, t)$ nécessite au préalable le calcul de $A_n(t)$ dans l'espace direct avant application de la transformée de Fourier. Il faut alors considérer les conditions limites du système. On écrit :

$$\begin{aligned} A_0 &= -L dt \left\{ \delta K_{N-1} [\delta u_0 - \delta u_{N-1} - p_{N-1}] \right. \\ &\quad \left. + \delta K_0 [\delta u_0 - \delta u_1 + p_0] \right\}, \\ A_n &= -L dt \left\{ \delta K_{n-1} [\delta u_n - \delta u_{n-1} - p_{n-1}] \right. \\ &\quad \left. + \delta K_n [\delta u_n - \delta u_{n+1} + p_n] \right\}, \quad \forall n \in [1, N-2], \\ A_{N-1} &= -L dt \left\{ \delta K_{N-2} [\delta u_{N-1} - \delta u_{N-2} - p_{N-2}] \right. \\ &\quad \left. + \delta K_{N-1} [\delta u_{N-1} - \delta u_0 + p_{N-1}] \right\}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

On peut dès lors appliquer la transformée de Fourier discrète au terme $A_n(t)$, calculer $\widehat{\delta u}(q, t + dt)$ à l'aide de l'équation (5.25), suivi de sa transformée de Fourier inverse donnant $\delta u_n(t + dt)$. Cette procédure est alors incluse dans une boucle ayant pour critère d'arrêt :

$$\max \{ \text{abs} \{ \delta u_n(t + dt) - \delta u_n(t) \} \} < \epsilon, \quad (5.27)$$

avec $\epsilon = 10^{-8}$. Ce critère permet de s'assurer de la validité de la condition d'équilibre exprimée dans l'équation (5.15).

En contraintes appliquées, il est nécessaire de calculer la déformation moyenne $\langle \varepsilon \rangle$ afin de construire entièrement la déformation totale ε_n :

$$\varepsilon_n = (\delta u)_{n+1} - (\delta u)_n + \langle \varepsilon \rangle. \quad (5.28)$$

La déformation moyenne $\langle \varepsilon \rangle$ est obtenue à l'aide de l'équation (5.16), qui résulte en l'équation suivante :

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sigma^{app}}{K_0} + \langle p \rangle - \frac{1}{K_0(N-1)} \sum_{n=0}^{N-2} \delta K_n [(\delta u)_{n+1} - (\delta u)_n + \langle \varepsilon \rangle - p_n]. \quad (5.29)$$

Son obtention nécessite alors l'application d'une méthode itérative de type point fixe :

$$\langle \varepsilon \rangle^{(i+1)} = \langle p \rangle^{(i)} + \frac{1}{K_0} \left[\sigma^{app} + \langle \delta K \delta \varepsilon \rangle^{(i)} + \langle \delta K \rangle^{(i)} \langle \varepsilon \rangle^{(i)} - \langle \delta K p \rangle^{(i)} \right], \quad (5.30)$$

en considérant $\frac{1}{N-1} \sum_{n=0}^{N-2} \square_n = \langle \square \rangle$. Le critère d'arrêt du point fixe est pris tel que :

$$\text{abs} \left\{ \langle \varepsilon \rangle^{(i+1)} - \langle \varepsilon \rangle^{(i)} \right\} < \epsilon_{CL}, \quad (5.31)$$

avec $\epsilon_{CL} = 10^{-10}$. Ce critère permet de s'assurer de la validité de la condition exprimée dans l'équation (5.16). Ainsi, les équations (5.25) et (5.30) permettent de résoudre entièrement le problème.

5.4.3 Résultats préliminaires

Dans cette section, le modèle présenté dans la [Section 5.4.2](#) est testé afin de voir si la non-différentiabilité du potentiel aux bords du domaine fondamental entraîne des problèmes numériques.

Les différentes grandeurs physiques considérées dans le problème sont adimensionnées. On considère une échelle d'énergie, de temps et de longueur telles que présentées dans le [tableau 5.1](#). La valeur de d correspond à la distance entre deux nœuds (pas de grille).

Densité d'énergie caractéristique f_{ad} (en GPa)	K
Longueur caractéristique l_{ad} (en m)	d
Temps caractéristique dissipation t_{ad} (en s)	$\frac{1}{L f_{ad}}$

TABLEAU 5.1 – Grandeurs caractéristiques utilisées pour l'adimensionnement.

Les grandeurs adimensionnées sont notées à l'aide d'un tilde. On a alors :

$$\tilde{K} = \frac{K}{f_{ad}} = 1$$

$$\tilde{u} = \frac{u}{d}$$

$$\tilde{L} = L \times f_{ad} t_{ad} = 1$$

$$\tilde{dt} = \frac{dt}{t_{ad}}$$

On note que le choix d'un temps caractéristique fonction de la mobilité L (en $\text{m}^3/\text{J}/\text{s}$) permet d'obtenir une mobilité adimensionnée valant 1.

Une simulation est lancée avec les paramètres adimensionnés précisés dans le [tableau 5.2](#) (la notation avec le tilde n'est plus utilisée pour faciliter la lecture). On considère alors un problème homogène (même raideur K pour l'ensemble des ressorts), avec prise en compte d'un incrément de contraintes $\Delta\sigma^{app}$ après chaque résolution de l'équilibre donné par les équations (5.15) et (5.16).

K	1
dt	10^{-9}
L	1
$\Delta\sigma^{app}$	10^{-3}

TABLEAU 5.2 – Paramètres numériques adimensionnés entrés dans la simulation.

On commence par vérifier que le comportement du système est bien élastique jusqu'à l'atteinte d'une déformation moyenne $\langle\varepsilon\rangle = 0,5$, valeur limite avant évolution de la variable p (avant *toppling*,

voir conditions de réduction de la section précédente). La [figure 5.6a](#) montre une représentation de l'évolution de la contrainte moyenne $\langle \sigma \rangle$ (appliquée, c.-à-d. $\langle \sigma \rangle = \sigma^{app}$) en fonction de la déformation moyenne $\langle \varepsilon \rangle$ pour les 500 premiers incréments de contrainte $\Delta \sigma^{app}$. Comme attendu, on observe alors un comportement linéaire, signifiant que l'on est encore dans le domaine fondamental \mathcal{D} .

On applique à présent un incrément de contrainte supplémentaire à l'état final du calcul précédent. On observe alors que la variable p évolue jusqu'à l'infini. En effet, dès lors que la contrainte seuil permettant la *toppling* est atteinte, le système se retrouve assujéti à rester en permanence sur un état correspondant au maximum de l'énergie représentée sur la [figure 5.5](#). Ainsi, à chaque évolution de p , le système se retrouve au bord du domaine fondamental, impliquant une évolution continue de la variable p . En d'autres termes, au delà d'une contrainte seuil, le système "surfe" indéfiniment sur les points de rebroussement qui marquent la périodicité du potentiel.

Pour éviter ce comportement, lié intrinsèquement au modèle simplifié dans une dimension, on considère une augmentation de la raideur des ressorts à chaque *toppling*. Ainsi, dès lors que p augmente, on considère une augmentation maximale de 3% de la raideur de chaque ressort. Un bruit est ajouté pour prendre en compte un caractère aléatoire de cet ajout sur chaque ressort. La [figure 5.6b](#) montre le résultat obtenu pour 650 incréments de contrainte $\Delta \sigma^{app}$.

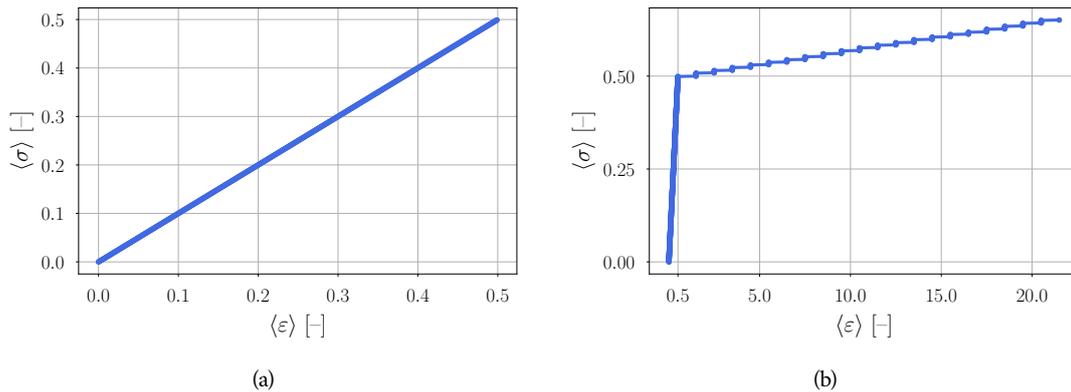


FIGURE 5.6 – Représentation de l'évolution de la contrainte moyenne (appliquée, adimensionnée) en fonction de la déformation moyenne du système (a) au bout de 500 $\Delta \sigma$, avant atteinte de la condition de réduction (avant *toppling*); (b) au bout de 650 $\Delta \sigma$.

La modification de la raideur des ressorts permet de modifier la courbure du potentiel, créant au fur et à mesure des *topplings* de la variable p et un comportement global typique d'un comportement plastique. On voit dès lors que le passage au delà du domaine fondamental D ne crée pas de problème du point de vue numérique.

5.4.4 Conclusion

Ce chapitre avait pour objectif de présenter une piste de développement possible d'un modèle qui permettrait, à terme, de simuler la formation hiérarchique de macles de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Cette piste de développement se base notamment sur des travaux réalisés dans le cadre des transformations martensitiques reconstructives et plus particulièrement à l'approche utilisée par [Conti et Zanzotto \[2004\]](#)

dans son modèle. Le concept d'élaboration d'un potentiel élastique non-linéaire dans un espace réduit des métriques (domaine fondamental), et différentes notions associées, sont présentées.

On évalue ensuite la capacité de ce concept à s'appliquer au problème de la formation hiérarchique de macles de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. La nécessité d'un *shuffle* des atomes en plus d'un cisaillement homogène pour créer le réseau maclé de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans un réseau c.c. crée une difficulté à la mise en place directe d'un potentiel dans le domaine fondamental. La transformation homogène qui lui est associée ne respecte pas la loi de Cauchy-Born. En effet, si l'on choisit de représenter le maclage qu'à l'aide du mouvement homogène des atomes (cisaillement), la métrique du réseau obtenu ne peut se réduire à la métrique du réseau cubique centré initial. Pour contrecarrer ce problème, on choisit de représenter le maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans un réseau cubique simple, sous-structure d'un réseau cubique centré, avec une valeur du cisaillement différente de celle observée pour le système de maclage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ dans le réseau cubique centré. La construction d'un potentiel associé à cette transformation devra faire l'objet de travaux ultérieurs.

Enfin, afin d'évaluer la faisabilité et le comportement numérique d'un modèle type restructif, un modèle simplifié 1D est proposé. Un système composé d'un assemblage de ressorts alignés est considéré. Pour chaque ressort, un potentiel énergétique composé d'une seule parabole dans un domaine fondamental (espace réduit des déformations) est pris en compte. Ce potentiel est équivalent à un potentiel composé d'une infinité de paraboles dans l'espace des déformations. Il est donc continu, mais non dérivable aux bords du domaine fondamental.

Lorsque les contraintes appliquées au système provoquent une sortie de ce domaine fondamental, des conditions de réduction sont mises en place, permettant de se ramener dans le domaine fondamental. La sortie du domaine fondamental provoque le *toppling* d'une variable de réduction, rendant compte du nombre de replis dans le domaine fondamental effectués au cours de simulation. Cette variable de réduction permet alors de reconstruire l'état de déformation réel du système. Les résultats préliminaires obtenus n'ont pas mis en évidence de problèmes numériques, malgré la non-dérivabilité du potentiel aux bords du domaine fondamental. Cela suggère qu'il n'est pas nécessaire d'imposer ces conditions de dérivabilité, ce qui simplifiera grandement la formulation d'un potentiel élastique non-linéaire dans l'espace des métriques 3D.

CONCLUSION GÉNÉRALE & PERSPECTIVES

Cette conclusion générale a pour but de clôturer les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit. Les principaux résultats obtenus concernant la modélisation par champ de phase de la croissance de macles mécaniques $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ au sein d'alliages de titane β -métastables seront rappelés. Aussi, on présentera quelques perspectives qui permettraient d'apporter des réponses supplémentaires concernant les différents points abordés au fil des chapitres.

Après un travail bibliographique sur le maclage dans les alliages de titane β -métastables, ces travaux de thèse se sont poursuivis par une première modélisation de la croissance de macles mécaniques $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ en se basant sur des modèles de la littérature ([Chapitre 2](#)). Exprimés dans le formalisme géométriquement linéaire, l'énergie élastique considérée dans ces modèles conduit, pour les macles mécaniques, au plan d'habitat observé $\{332\}$ mais également au plan d'habitat $\{11\bar{3}\}$, qui n'est pas observé expérimentalement. La sélection du plan d'habitat $\{332\}$ est alors obtenue par l'utilisation d'une énergie d'interface entre macle et matrice très anisotrope.

Dans ces modèles de champ de phase, l'anisotropie de l'énergie d'interface est introduite au travers d'un terme de gradient anisotrope. Cependant, nous avons montré analytiquement et numériquement que cette approche ne permet pas de prendre en compte des anisotropies importantes puisque l'épaisseur d'interface au niveau de la pointe croît avec le rapport entre les énergies d'interface maximale et minimale, et devient bien plus grand que le rayon de courbure de la pointe du domaine de macle. En s'inspirant de travaux de champ de phase effectués dans un autre contexte, nous avons alors développé un nouveau modèle de champ de phase pour le maclage, toujours dans le formalisme géométriquement linéaire, mais qui permet de prendre en compte une anisotropie de l'énergie d'interface tout en conservant une largeur d'interface identique pour toutes les orientations d'interface. Ce modèle a ensuite été utilisé à deux et trois dimensions afin d'étudier la croissance d'un germe de macle.

En terme de perspectives concernant ces travaux, il serait intéressant d'améliorer l'implémentation numérique du modèle à énergie d'interface anisotrope et à largeur d'interface constante afin qu'il puisse simuler des croissances de précipités ou modes de déformations quand l'anisotropie de l'énergie d'in-

terface est très élevée. Un autre point sur lequel il est important d'améliorer la modélisation est la prise en compte d'énergies d'interface réalistes. En effet, nous avons montré que, malgré l'utilisation de fonctions d'interpolation non-linéaires, le couplage avec les champs mécaniques très importants modifie fortement le profil du champ de phase au travers de l'interface, ce qui peut conduire à des artefacts numériques dans les simulations. Pour résoudre ce problème, nous avons fait dans ce travail le choix pragmatique d'augmenter fortement l'énergie d'interface dans nos simulations. Afin d'améliorer notre modélisation, la prise en compte d'une largeur d'interface physique plus petite est toutefois nécessaire. Pour cela, une solution serait de considérer un raffinement de la discrétisation spatiale, engendrant une augmentation de la mémoire et du temps de calcul nécessaires pour simuler des systèmes de mêmes dimensions physiques. Une autre possibilité, présentant moins d'inconvénient, serait de mettre en place la méthode champ de phase à interface dite *sharp* (SPFM) développée très récemment par [Finel *et al.* \[2018\]](#) et qui a l'avantage de permettre l'utilisation d'interface dont l'épaisseur est très fine, de l'ordre de 1 à 2 pas de discrétisation.

L'étape suivante du travail a été le développement d'une modélisation dans le formalisme géométriquement non-linéaire, qui est nécessaire à une description correcte des mécanismes de déformation puisque le maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ induit un cisaillement important. Tout d'abord, un travail important a été réalisé afin d'implémenter dans le code champ de phase un solveur mécanique spectral adapté aux grandes déformations. La résolution de l'équilibre mécanique était jusqu'alors réalisée à l'aide de méthodes spectrales (solveur FFT) adaptées aux petites déformations. Afin de garder les avantages liés à ce type de solveur, on s'est intéressé aux possibilités de les mettre en oeuvre dans un formalisme géométriquement non-linéaire. La mise en place de ce solveur a été détaillée dans le [Chapitre 3](#). La détermination des paramètres permettant d'assurer la convergence, en un nombre acceptable d'étapes, de l'algorithme itératif au cœur du solveur a été également discutée.

Sur le plan numérique, il serait intéressant, à l'avenir, d'améliorer le solveur en considérant trois approches : (1) tout en gardant le même algorithme, améliorer l'optimisation du choix du tenseur élastique de référence et des conditions initiales; (2) développer une version parallèle, de manière à le rendre beaucoup plus efficace; (3) formuler les équations d'équilibre d'une autre manière, de façon à identifier d'autres algorithmes itératifs (voir par ex. les travaux de [Kabel *et al.* \[2014\]](#)).

Par ailleurs, nous avons noté que, pour des systèmes fortement hétérogènes et en présence de champs mécaniques importants, l'équilibre mécanique obtenu par la méthode spectral utilisée ici présente des oscillations. Ce solveur est en effet issu d'une écriture continue des équations de la mécanique. Le support, en principe infini, des séries de Fourier associées à sa formulation spectrale, est, dans l'implémentation numérique, nécessairement tronqué. Cette coupure haute fréquence génère des artefacts, dont le plus manifeste est l'apparition d'oscillations artificielles dans les champs mécaniques. L'utilisation d'une interface suffisamment diffuse permet le plus souvent d'empêcher l'apparition de ces oscillations, mais ce n'est pas toujours le cas. Des solutions à ce problème ont été récemment proposés dans la littérature à l'aide d'une décomposition en sous-voxels ([Ruffini *et al.* \[2017\]](#)), ou dans les travaux en cours de développement au Laboratoire d'Étude des Microstructures (LEM, ONERA-CNRS) utilisant comme point de départ une écriture discrétisée du problème mécanique (A. Finel, à paraître). Ainsi, la mise en place de ces solutions permettrait d'améliorer la robustesse du solveur. Un travail préliminaire d'implément-

tation de ces nouveaux solveurs a été réalisé au cours de ces travaux de thèse mais n'est pas présentée dans le manuscrit.

Une fois le solveur mécanique FFT dans le formalisme géométriquement non-linéaire mis en place, il a été possible de simuler la croissance anisotrope de différents variants de macles de type $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ à l'aide de la méthode champ de phase. Une comparaison des microstructures obtenues entre formalisme géométriquement linéaire et non-linéaire ont montré des différences importantes au niveau des orientations des plaquettes de macle obtenues. On a alors montré que l'origine de ces différences étaient liées aux non-linéarités prises en compte dans le formalisme géométriquement non-linéaire, induites par l'amplitude importante du cisaillement associé au système de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. S'il est possible de s'affranchir des problèmes liés à la valeur importante de l'énergie d'interface (voir perspectives du [Chapitre 2](#)), ce modèle permettrait de déterminer quantitativement les valeurs de contraintes nécessaires à la nucléation de variants de macle $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Différents types de défauts pourraient être introduits, tels que des joints de grains, des pores ou des fissures, et leurs effets sur la sélection de variants de macle et l'obtention de microstructures plus ou moins complexes pourraient être étudiés. On pourrait également prendre en compte des précipités α'' au sein du matériau, et chercher à comprendre leur rôle sur l'apparition de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. En effet, l'origine du mode de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ restant une question ouverte, il peut être intéressant d'étudier l'influence de précipités α'' pré-existants (voir [Chapitre 1](#)).

Enfin, les travaux de thèse présentés dans ce manuscrit n'ont concerné que l'apparition des macles primaires. En effet, les modèles champ de phase utilisés ici sont basés sur des approches de Landau classiques, non adaptées à l'apparition successive de macles de générations suivantes. Ces modèles sont donc limités à l'apparition d'un seul "niveau" de transformation.

Nous avons cependant présenté, dans le [Chapitre 5](#), une idée de modèle qui permettrait d'apporter une solution à cette problématique. Ce modèle, du type de ceux présentés dans les travaux de [Conti et Zanzotto \[2004\]](#) et [Bhattacharya et al. \[2004\]](#) (voir aussi [Salman et Baggio \[2019\]](#) et [Baggio et al. \[2019\]](#)) est basé sur une technique de réduction de Lagrange (ou Seeber). Pour l'essentiel, il suffit de définir un potentiel élastique dans le domaine fondamental de l'espace des métriques, son extension à l'ensemble de l'espace étant simplement obtenue par l'action du groupe unimodulaire $GL(3, \mathbb{Z})$. Le point important que nous avons analysé dans le [Chapitre 5](#) est qu'il n'est pas nécessaire d'imposer au potentiel élastique de vérifier des conditions de régularité fortes sur les bords du domaine fondamental, autre que celle de sa continuité. Ce point est essentiel car imposer des conditions de régularité sur les dérivées du potentiel nécessiterait l'utilisation de potentiel non-linéaire d'ordre élevé, ce qui est délicat et augmenterait significativement le caractère phénoménologique du potentiel obtenu. Dans la situation présente, qui consiste à reproduire des macles mécaniques d'un réseau unique, il suffirait ainsi de définir, dans le domaine fondamental, un potentiel élastique simplement quadratique dont la calibration ne nécessite que la connaissance des constantes élastiques.

La mise en place de ce modèle pourrait, à terme, non seulement permettre de générer des systèmes de maillages hiérarchiques, mais également l'ensemble des modes de déformations observés dans les alliages de titane β -métastables en définissant, dans le domaine fondamental, un potentiel élastique

non-linéaire adapté. Il serait alors possible d'étudier la chaîne d'apparition des différents mécanismes de déformation dans les alliages de titane β -métastables, à l'origine des microstructures complexes observées et du comportement mécanique hors du commun qu'elles induisent.

ANNEXE

A

NOTATIONS UTILISÉES

Les notations utilisées dans ce manuscrit sont résumées dans cette annexe :

\underline{a}	Vecteur	a_i
\underline{F}	Tenseur d'ordre 2	F_{ij}
$\underline{\lambda}$	Tenseur d'ordre 4	λ_{ijkl}
$\underline{C} = \underline{F}^T$	Transposée tenseur d'ordre 2	$C_{ij} = F_{ji}$
δ_{ij}	Symbole de Kronecker	$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$
ϵ_{ijk}	Symbole de Levi-Civita	$\det \begin{pmatrix} \delta_{i1} & \delta_{i2} & \delta_{i3} \\ \delta_{j1} & \delta_{j2} & \delta_{j3} \\ \delta_{k1} & \delta_{k2} & \delta_{k3} \end{pmatrix}$
$\underline{c} = \underline{a} \wedge \underline{b}$	Produit vectoriel	$c_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k$
$c = \underline{a} \cdot \underline{b}$	Produit scalaire	$c = a_i b_i$
$\underline{c} = \underline{F} \cdot \underline{b}$	Produit scalaire	$c_i = F_{ij} b_j$
$\underline{C} = \underline{F} \cdot \underline{G}$	Produit scalaire	$C_{ij} = F_{ik} G_{kj}$
$\underline{C} = \underline{\lambda} \cdot \underline{G}$	Produit scalaire	$C_{ijkl} = \lambda_{ijkl} G_{ml}$
$c = \underline{F} : \underline{G}$	Produit doublement contracté	$c = F_{ij} G_{ij}$
$\underline{C} = \underline{\lambda} : \underline{G}$	Produit doublement contracté	$C_{ij} = \lambda_{ijkl} G_{kl}$
$\underline{C} = \underline{a} \otimes \underline{b}$	Produit dyadique	$C_{ij} = a_i b_j$

ANNEXE

B

DONNÉES CONCERNANT LES VARIANTS DE MACLE $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$

Dans cette annexe, on récapitule les différents éléments caractérisants les variants du système de maillage $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ étudiés au cours de ces travaux de thèse.

B.1 Éléments cristallographiques

Le **tableau B.1** répertorie les éléments cristallographiques définissant les douze variants de macles $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$, numérotés par (i) , $i \in [1,12]$.

On y retrouve la direction de cisaillement $\underline{\eta}_1^{(i)}$, la normale au plan de maillage $\underline{K}_1^{(i)}$, et la normale au plan de cisaillement $\underline{P}^{(i)}$. On renseigne également la direction de maillage réciproque $\underline{\eta}_2^{(i)}$ et les normales aux plans de maillage réciproques $\underline{K}_2^{(i)}$. Ces éléments sont obtenus par l'application des opérations de symétrie du réseau cubique. La numérotation utilisée est identique à celle que l'on retrouve dans les différents chapitres de cette thèse.

B.2 Matrices de transformation miroir

À partir des données de la section précédente, on peut construire les matrices $\underline{Q}^{(i)}$ associées à chacun des variants de maile $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ permettant d'appliquer la transformation miroir amenant un réseau c.c. initial à un réseau c.c. en relation de maile $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$. Ces matrices sont définies par :

$$\underline{Q}^{(i)} = \underline{\mathbb{I}} - 2 \left(\underline{\tilde{K}}_1^{(i)} \otimes \underline{\tilde{K}}_1^{(i)} \right) \quad (\text{B.1})$$

où $\underline{\tilde{K}}_1^{(i)}$ est le vecteur unitaire dans la direction normale au plan de maillage $\underline{K}_1^{(i)}$. Ces matrices sont utilisées lors de la prise en compte de l'anisotropie des constantes élastiques dans les modèles champ

Numérotation (i)	$\underline{\eta}_1^{(i)}$	$\underline{K}_1^{(i)}$	$\underline{\eta}_2^{(i)}$	$\underline{K}_2^{(i)}$	$\underline{P}^{(i)}$
1	[11 $\bar{3}$]	[332]	[111]	[11 $\bar{2}$]	[1 $\bar{1}$ 0]
2	[113]	[33 $\bar{2}$]	[11 $\bar{1}$]	[112]	[$\bar{1}$ 10]
3	[3 $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[$\bar{2}$ 33]	[$\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[01 $\bar{1}$]
4	[$\bar{3}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[2 $\bar{3}$ 3]	[1 $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[$\bar{2}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[011]
5	[$\bar{1}$ 3 $\bar{1}$]	[32 $\bar{3}$]	[$\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[$\bar{1}$ 2 $\bar{1}$]	[$\bar{1}$ 01]
6	[$\bar{1}$ 31]	[$\bar{3}$ 23]	[$\bar{1}$ 11]	[$\bar{1}$ 21]	[$\bar{1}$ 0 $\bar{1}$]
7	[$\bar{1}$ 3 $\bar{1}$]	[32 $\bar{3}$]	[$\bar{1}$ 11]	[$\bar{1}$ 2 $\bar{1}$]	[10 $\bar{1}$]
8	[$\bar{1}$ 31]	[$\bar{3}$ 23]	[$\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[$\bar{1}$ 21]	[101]
9	[3 $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[$\bar{2}$ 33]	[$\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[0 $\bar{1}$ $\bar{1}$]
10	[$\bar{3}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[2 $\bar{3}$ 3]	[1 $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[$\bar{2}$ $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[0 $\bar{1}$ 1]
11	[1 $\bar{1}$ 3]	[33 $\bar{2}$]	[1 $\bar{1}$ $\bar{1}$]	[1 $\bar{1}$ 2]	[110]
12	[$\bar{1}$ 13]	[33 $\bar{2}$]	[$\bar{1}$ 11]	[$\bar{1}$ 12]	[$\bar{1}$ 10]

TABLEAU B.1 – Données cristallographiques concernant les douze variants de macle {332} \langle 11 $\bar{3}$ \rangle .

de phase des Chapitres 2 et 4.

B.3 Tenseurs de déformation libre

Dans le cadre géométriquement linéaire, les tenseurs de déformation libre $\underline{\varepsilon}^{0(i)}$ associés à chacun des variants de macle {332} \langle 11 $\bar{3}$ \rangle sont donnés par :

$$\underline{\varepsilon}^{0(i)} = \frac{\gamma_{tw}}{2} \left(\tilde{\underline{\eta}}_1^{(i)} \otimes \tilde{\underline{K}}_1^{(i)} + \tilde{\underline{K}}_1^{(i)} \otimes \tilde{\underline{\eta}}_1^{(i)} \right). \quad (\text{B.2})$$

où $\tilde{\underline{\eta}}_1^{(i)}$ est le vecteur unitaire dans la direction de cisaillement $\underline{\eta}_1^{(i)}$.

Dans le cadre géométriquement non-linéaire, les tenseurs gradient de déplacement libre $\nabla \underline{u}^{0(i)}$ associés à chacun des variants de macle {332} \langle 11 $\bar{3}$ \rangle sont donnés par :

$$\nabla \underline{u}^{0(i)} = \gamma_{tw} \left(\tilde{\underline{\eta}}_1^{(i)} \otimes \tilde{\underline{K}}_1^{(i)} \right). \quad (\text{B.3})$$

Dans les équations (B.2) et (B.3), γ_{tw} correspond au cisaillement intrinsèque du mode de maillage {332} \langle 11 $\bar{3}$ \rangle et vaut $\sqrt{2}/4$.

ANNEXE

C

RÉSOLUTION DE L'ÉQUILIBRE MÉCANIQUE DANS LE CADRE GÉOMÉTRIQUEMENT LINÉAIRE PAR MÉTHODE SPECTRALE

Dans cette annexe, nous donnons les détails de l'algorithme de résolution de l'équilibre mécanique par méthode spectrale, dans le formalisme géométriquement linéaire, utilisé dans les Chapitres 2 et 4.

On considère un système mécanique inhomogène de volume V composé de N phases auxquelles on associe des tenseurs de déformation libre et des tenseurs de constantes élastiques. On considère des conditions limites de type contraintes appliquées $\underline{\sigma}^{app}$ (c.-à-d. moyenne spatiale des contraintes $\langle \sigma \rangle = \underline{\sigma}^{app}$). Le potentiel élastique \mathcal{F}_{el} pertinent dans ce cas est défini par :

$$\mathcal{F}_{el} = \int_V \frac{1}{2} \underline{\xi}^{el}(\underline{\mathcal{X}}) : \underline{\lambda}(\underline{\mathcal{X}}) : \underline{\xi}^{el}(\underline{\mathcal{X}}) dV - V \underline{\sigma}^{app} : \langle \underline{\xi} \rangle, \quad (\text{C.1})$$

où $\underline{\xi}^{el}(\underline{\mathcal{X}}) = \underline{\xi}(\underline{\mathcal{X}}) - \underline{\xi}^*(\underline{\mathcal{X}})$ est le tenseur de déformation élastique, $\underline{\xi}$ le tenseur de déformation totale, $\underline{\xi}^*$ la valeur du champ de tenseur de déformation libre en $\underline{\mathcal{X}}$, $\langle \underline{\xi} \rangle$ le tenseur de déformation moyenne, $\underline{\lambda}$ la valeur du champ de tenseur des constantes élastiques et $\underline{\sigma}^{app}$ le tenseur des contraintes appliquées. Dans une approche en champ de phase, il est naturel d'exprimer les champs de tenseur de déformation libre et de tenseur des constantes élastiques en fonction des champs qui caractérisent la microstructure (e.g. champ de phase, champ de concentration, ...). Un exemple est fourni par les relations (2.62) et (2.63). Dans cette annexe, on a choisi une présentation générale qui suppose uniquement la connaissance des champs de tenseur de déformation libre et de constantes élastiques.

On décompose le tenseur de déformation totale $\underline{\xi}$ de la manière suivante :

$$\varepsilon_{ij}(\underline{\mathcal{X}}) = \langle \underline{\xi} \rangle_{ij} + \delta \varepsilon_{ij}(\underline{\mathcal{X}}), \quad (\text{C.2})$$

où $\delta\tilde{\varepsilon}(\underline{\mathcal{X}})$ est la fluctuation par rapport à la moyenne. Dans le cadre géométriquement linéaire, ce tenseur s'exprime de la façon suivante :

$$\delta\varepsilon_{ij}(\underline{\mathcal{X}}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial\delta u_i}{\partial\mathcal{X}_j} + \frac{\partial\delta u_j}{\partial\mathcal{X}_i} \right), \quad (\text{C.3})$$

où $\delta\mathbf{u}(\underline{\mathcal{X}})$ est la fluctuation des déplacements, c.-à-d. $\mathbf{u}(\underline{\mathcal{X}}) = \delta\mathbf{u}(\underline{\mathcal{X}}) + \langle \tilde{\varepsilon} \rangle \cdot \underline{\mathcal{X}}$.

Le système est à l'équilibre mécanique statique si les conditions suivantes sont vérifiées :

$$\frac{\delta\mathcal{F}_{el}}{\delta(\delta\mathbf{u})} = 0, \quad (\text{C.4})$$

$$\frac{\delta\mathcal{F}_{el}}{\delta\langle \tilde{\varepsilon} \rangle} = 0. \quad (\text{C.5})$$

L'équation (C.4) peut également se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial\mathcal{X}_j}(\underline{\mathcal{X}}) = 0, \quad \text{avec} \quad \sigma_{ij}(\underline{\mathcal{X}}) = \lambda_{ijkl}(\underline{\mathcal{X}}) \varepsilon_{kl}^{el}(\underline{\mathcal{X}}), \quad (\text{C.6})$$

où $\sigma = \frac{\partial\mathcal{F}_{el}}{\partial\tilde{\varepsilon}^{el}}$ est le tenseur des contraintes de Cauchy symétrique, respectant ici la loi de Hooke.

On considère ensuite une décomposition additive du tenseur des constantes élastiques $\lambda(\underline{\mathcal{X}})$ en une partie homogène λ^0 et en une partie inhomogène $\delta\lambda(\underline{\mathcal{X}})$:

$$\lambda(\underline{\mathcal{X}}) = \lambda^0 + \delta\lambda(\underline{\mathcal{X}}). \quad (\text{C.7})$$

Le choix de λ^0 est arbitraire mais influe fortement sur la vitesse de convergence du solveur. La moyenne arithmétique des constantes élastiques des phases est le choix le plus courant (pour une justification dans le cas isotrope, voir [Moulinec et Suquet \[1998\]](#)).

On peut alors introduire l'équation (C.7) dans l'équation (C.6) et écrire :

$$\frac{\partial}{\partial\mathcal{X}_j} [\lambda_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl}(\underline{\mathcal{X}}) + \tau_{ij}(\underline{\mathcal{X}})] = 0, \quad (\text{C.8})$$

où

$$\tau_{ij}(\underline{\mathcal{X}}) = \delta\lambda_{ijkl}(\underline{\mathcal{X}}) [\varepsilon_{kl}(\underline{\mathcal{X}}) - \varepsilon_{kl}^*(\underline{\mathcal{X}})] - \lambda_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl}^*(\underline{\mathcal{X}}). \quad (\text{C.9})$$

En s'aidant de l'équation (C.2), l'équation (C.8) se réécrit de la façon suivante :

$$\lambda_{ijkl}^0 \frac{\partial}{\partial\mathcal{X}_j} [\delta\varepsilon_{kl}(\underline{\mathcal{X}})] = -\frac{\partial}{\partial\mathcal{X}_j} [\tau_{ij}(\underline{\mathcal{X}})]. \quad (\text{C.10})$$

En considérant à présent l'équation (C.3) et les symétries du tenseur λ^0 , l'équation (C.10) devient :

$$\lambda_{ijkl}^0 \frac{\partial^2(\delta u)_k}{\partial\mathcal{X}_j\partial\mathcal{X}_l}(\underline{\mathcal{X}}) = -\frac{\partial}{\partial\mathcal{X}_j} [\tau_{ij}(\underline{\mathcal{X}})]. \quad (\text{C.11})$$

L'équation (C.11) peut facilement s'exprimer dans l'espace de Fourier. En considérant le vecteur d'onde \underline{q} associé au vecteur $\underline{\mathcal{X}}$ de l'espace réel, on obtient :

$$\lambda_{ijkl}^0 q_j q_l \widehat{\delta u}_k(\underline{q}) = i \widehat{\tau}_{ij}(\underline{q}) q_j, \quad (\text{C.12})$$

où la notation $\widehat{\square}$ correspond à la transformée de Fourier de l'entité \square . On considère maintenant la matrice $G_{\underline{x}}^0(\underline{q})$ définie pour tout $\underline{q} \neq 0$ tel que $\lambda_{ijkl}^0 q_j q_l = G_{ik}^0{}^{-1}$. L'équation (C.12) permet alors d'obtenir l'expression suivante :

$$\widehat{\delta u}_k(\underline{q}) = \begin{cases} i G_{ki}^0(\underline{q}) \widehat{\tau}_{ij}(\underline{q}) q_j & \forall \underline{q} \neq 0, \\ 0 & \underline{q} = 0. \end{cases} \quad (\text{C.13a})$$

$$(\text{C.13b})$$

La résolution de l'équation (C.5) est ensuite nécessaire pour obtenir le tenseur de déformation moyenne $\langle \varepsilon \rangle$. En effet, après calcul et simplification, l'équation (C.5) nous donne :

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle_{ij} = \langle \varepsilon^* \rangle_{ij} + S_{ijkl}^0 & \left[\sigma_{kl}^{app} \right. \\ & + \langle \delta \lambda_{klmn}(\underline{\mathcal{X}}) \varepsilon_{mn}^*(\underline{\mathcal{X}}) \rangle \\ & - \langle \delta \lambda_{klmn}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle \langle \varepsilon \rangle_{mn} \\ & \left. - \langle \delta \lambda_{klmn}(\underline{\mathcal{X}}) \delta \varepsilon_{mn}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle \right], \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

où $S_{ij}^0 = \lambda_{ij}^{0-1}$ correspond au tenseur des souplesse du milieu de référence homogène. Les équations (C.13a) et (C.14) sont alors résolues de manière couplée dans un algorithme de point fixe :

$$\widehat{\delta u}_k^{(i+1)}(\underline{q}) = i G_{ki}^0(\underline{q}) \widehat{\tau}_{ij}^{(i)}(\underline{q}) q_j, \quad (\text{C.15})$$

et

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle_{ij}^{(i+1)} = \langle \varepsilon^* \rangle_{ij}^{(i)} + S_{ijkl}^0 & \left[\sigma_{kl}^{app} \right. \\ & + \langle \delta \lambda_{klmn}^{(i)}(\underline{\mathcal{X}}) \varepsilon_{mn}^{*(i)}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle \\ & - \langle \delta \lambda_{klmn}^{(i)}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle \langle \varepsilon \rangle_{mn}^{(i)} \\ & \left. - \langle \delta \lambda_{klmn}^{(i)}(\underline{\mathcal{X}}) \delta \varepsilon_{mn}^{(i)}(\underline{\mathcal{X}}) \rangle \right], \end{aligned} \quad (\text{C.16})$$

où (i) représente le numéro de l'itération. À chaque itération, le terme de fluctuation locale des déformations $\widehat{\delta \varepsilon}^{(i+1)}(\underline{q})$ est calculé à l'aide de l'équation (C.15) et de l'équation (C.3) dans l'espace de Fourier. Une transformée de Fourier inverse permet ensuite de déterminer $\delta \varepsilon^{(i+1)}(\underline{\mathcal{X}})$. Associé à l'équation (C.16), il permet finalement de construire le tenseur de déformation totale $\varepsilon^{(i+1)}$.

L'algorithme s'arrête lorsque les critères d'arrêt suivants sont atteints, assurant que l'équilibre mécanique est atteint aux précisions voulues :

$$\sqrt{\sum_{k=1}^3 \left(\sum_{\underline{q}} \widehat{f}_k(\underline{q}) \right)^2} \leq \epsilon, \quad (\text{C.17})$$

$$\sum_{k,l} \left| \langle \varepsilon \rangle_{kl}^{(i+1)} - \langle \varepsilon \rangle_{kl}^{(i)} \right| \leq \epsilon_{CL}, \quad (\text{C.18})$$

où $\widehat{f}_k(\underline{q}) = i q_j \sigma_{kj}$ correspond à la transformée de Fourier de la force $\underline{f} = \text{div } \underline{\sigma}$. Dans nos simulations, nous avons choisi les critères suivants : $\epsilon = 10^{-8}$ et $\epsilon_{CL} = 10^{-6}$.

À noter que dans le cas de conditions limites périodiques en déformation appliquée (c.-à-d. moyenne spatiale des déformations $\langle \varepsilon \rangle = \varepsilon^{app}$), le second terme du potentiel élastique exprimé dans l'équation (C.1) est absent. Il n'est plus nécessaire de résoudre l'équation (C.5) et de vérifier le critère d'arrêt (C.18).

ANNEXE

D

CALCUL DE LA FORCE MOTRICE ÉLASTIQUE DANS LE CADRE GÉOMÉTRIQUEMENT NON-LINÉAIRE

Dans cette annexe, on retrouve le détail du calcul permettant d'obtenir l'équation (4.5), représentant la force motrice élastique retrouvée dans le modèle champ de phase de maillage mécanique exprimé dans le cadre géométriquement non-linéaire.

On part de l'expression du potentiel élastique exprimé dans l'équation (4.3) :

$$\mathcal{F}_{el} = \int_{\Omega} f_{el} dV = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}}^e : \underline{\underline{\lambda}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e - \underline{\underline{P}}^{app} : \langle \underline{\underline{F}}^T \rangle dV. \quad (D.1)$$

La dérivée fonctionnelle de ce potentiel par rapport au champ de phase $\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi}$ représente la force motrice élastique participant à l'évolution du système. On a ainsi :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi} = \frac{\partial f_{el}}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}}^e(\varphi) : \underline{\underline{\lambda}}(\varphi) : \underline{\underline{\varepsilon}}^e(\varphi) \right). \quad (D.2)$$

En prenant en compte la symétrie du tenseur $\underline{\underline{\lambda}}$, et en passant en indiciel, on a :

$$\frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij}^e(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\lambda_{ijkl}(\varphi) \right] \varepsilon_{kl}^e(\varphi) \quad (D.3)$$

$$+ \lambda_{ijkl}(\varphi) \varepsilon_{kl}^e(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\varepsilon_{ij}^e(\varphi) \right]. \quad (D.4)$$

En considérant $\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{\lambda}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e$ le second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff, on écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{F}_{el}}{\delta \varphi} &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ij}^e(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\lambda_{ijkl}(\varphi) \right] \varepsilon_{kl}^e(\varphi) \\ &+ S_{ij}(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\varepsilon_{ij}^e(\varphi) \right]. \end{aligned} \quad (D.5)$$

On explicite alors le calcul de la dérivée du tenseur des déformations élastiques de Green-Lagrange :

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} [\varepsilon_{ij}^e(\varphi)] = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} [C_{ij}^e(\varphi) - \delta_{ij}] \quad (\text{D.6})$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{ki}^e(\varphi) F_{kj}^e(\varphi)] \quad (\text{D.7})$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{ki}^e(\varphi)] F_{kj}^e(\varphi) + F_{ki}^e(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{kj}^e(\varphi)] \right\} \quad (\text{D.8})$$

$$= F_{ki}^e(\varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{kj}^e(\varphi)]. \quad (\text{D.9})$$

On rappelle la décomposition multiplicative du tenseur gradient de transformation $\underline{F} = \underline{F}^e \cdot \underline{F}^*$. On continue alors le calcul précédent (la variable φ n'est plus spécifiée pour alléger l'écriture) :

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} [\varepsilon_{ij}^e] = F_{ki}^e \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{kn} (F^{*-1})_{nj}] \quad (\text{D.10})$$

$$= F_{ki}^e F_{kn} \frac{\partial}{\partial \varphi} [(F^{*-1})_{nj}] \quad (\text{D.11})$$

$$= F_{ki}^e F_{kq}^e F_{qn}^* \frac{\partial}{\partial \varphi} [(F^{*-1})_{nj}]. \quad (\text{D.12})$$

Or, on peut écrire :

$$F_{qn}^* \frac{\partial}{\partial \varphi} [(F^{*-1})_{nj}] = \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{qn}^* (F^{*-1})_{nj}] - \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{qn}^*] (F^{*-1})_{nj} \quad (\text{D.13})$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{qn}^*] (F^{*-1})_{nj}. \quad (\text{D.14})$$

On peut alors écrire :

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} [\varepsilon_{ij}^e] = F_{ki}^e F_{kn} \frac{\partial}{\partial \varphi} [(F^{*-1})_{nj}] \quad (\text{D.15})$$

$$= -F_{ki}^e F_{kq}^e \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{qn}^*] (F^{*-1})_{nj} \quad (\text{D.16})$$

$$= -C_{iq}^e \frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{qn}^*] (F^{*-1})_{nj}. \quad (\text{D.17})$$

Or, dans le contexte de la [Section 4.1](#), on a :

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} [F_{qn}^*] = \frac{\partial}{\partial \varphi} [h(\varphi)] \nabla \underline{u}_{qn}^0. \quad (\text{D.18})$$

En injectant l'équation (D.17) dans l'équation (D.5), on obtient :

$$\frac{\partial f_{el}}{\partial \varphi} = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij}^e \frac{\partial}{\partial \varphi} [\lambda_{ijkl}(\varphi)] \varepsilon_{kl}^e - S_{ij} C_{im}^e \frac{\partial}{\partial \varphi} [h(\varphi)] \nabla \underline{u}_{mn}^0 (F^{*-1})_{nj}, \quad (\text{D.19})$$

ou encore :

$$\frac{\partial f_{el}}{\partial \varphi} = \frac{1}{2} \underline{\varepsilon}^e : \underline{\lambda}'(\varphi) : \underline{\varepsilon}^e - \underline{S} : [\underline{C}^e \cdot h'(\varphi) \nabla \underline{u}^0 \cdot (\underline{F}^*)^{-1}]. \quad (\text{D.20})$$

BIBLIOGRAPHIE

- ABDEL-HADY, M., HINOSHITA, K. et MORINAGA, M. (2006). General approach to phase stability and elastic properties of β -type Ti-alloys using electronic parameters. *Scripta Materialia*, 55(5):477–480. [Cité page 11.]
- ALLEN, S. M. et CAHN, J. W. (1979). A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metallurgica*, 27(6):1085 – 1095. [Cité pages 2, 27, 36, et 37.]
- AMMAR, K., APPOLAIRE, B., CAILLETAUD, G. et FOREST, S. (2011). Phase field modeling of elasto-plastic deformation induced by diffusion controlled growth of a misfitting spherical precipitate. *Philosophical Magazine Letters*, 91(3):164–172. [Cité page 147.]
- ARTEMEV, A., JIN, Y. et KHACHATURYAN, A. G. (2001). Three-dimensional phase field model of proper martensitic transformation. *Acta Materialia*, 49(7):1165–1177. [Cité page 27.]
- ASTM INTERNATIONAL (2018). Standard specification for wrought titanium-15 molybdenum alloy for surgical implant applications (uns r58150). Standard ASTM F2066-18, ASTM International, West Conshohocken, Pennsylvania, USA. [Cité page 10.]
- BAGGIO, R., ARBIB, E., BISCARI, P., CONTI, S., TRUSKINOVSKY, L., ZANZOTTO, G. et SALMAN, O. U. (2019). Landau-Type Theory of Planar Crystal Plasticity. *Physical Review Letters*, 123(20):205501. [Cité pages 164 et 175.]
- BANERJEE, D. et WILLIAMS, J. (2013). Perspectives on titanium science and technology. *Acta Materialia*, 61(3):844–879. [Cité page 9.]
- BANERJEE, S., TEWARI, R. et DEY, G. K. (2006). Omega phase transformation - Morphologies and mechanisms. *International Journal of Materials Research*, 97(7):963–977. [Cité pages 13 et 14.]
- BANIA, P. J. (1994). Beta titanium alloys and their role in the titanium industry. *JOM*, 46(7):16–19. [Cité pages 7 et 9.]

- BARSC, G. et KRUMHANS, J. (1984). Twin boundaries in ferroelastic media without interface dislocations. *Physical Review Letters*, 53(11):1069–1072. [Cité page 32.]
- BHATTACHARYA, K. et al. (2003). *Microstructure of martensite : why it forms and how it gives rise to the shape-memory effect*, volume 2. Oxford University Press. [Cité pages 24 et 25.]
- BHATTACHARYA, K., CONTI, S., ZANZOTTO, G. et ZIMMER, J. (2004). Crystal symmetry and the reversibility of martensitic transformations. *Nature*, 428(6978):55–59. [Cité pages 159, 164, et 175.]
- BILBY, B. A. et CROCKER, A. G. (1965). The Theory of the Crystallography of Deformation Twinning. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 288(1413):240–255. [Cité pages 17 et 20.]
- BLACKBURN, M. J. et FEENEY, J. A. (1970). Stress-induced transformations in Ti-Mo alloys. Rapport technique, Boeing Co, Renton Wa, Commercial Airplane Group. [Cité pages 13, 18, 20, et 145.]
- BOUCHER, N. A. et CHRISTIAN, J. W. (1972). The influence of pre-strain on deformation twinning in niobium single crystals. *Acta Metallurgica*, 20(4):581–591. [Cité page 18.]
- BOUSSINOT, G., LE BOUAR, Y. et FINEL, A. (2010). Phase-field simulations with inhomogeneous elasticity : Comparison with an atomic-scale method and application to superalloys. *Acta Materialia*, 58(12):4170–4181. [Cité page 44.]
- BOYER, R. R. (1994). Aerospace applications of beta titanium alloys. *JOM*, 46(7):20–23. [Cité page 9.]
- BRONCHART, Q., LE BOUAR, Y. et FINEL, A. (2008). New coarse-grained derivation of a phase field model for precipitation. *Phys. Rev. Lett.*, 100:015702. [Cité page 33.]
- BROZEK, C. (2017). *Conception et développement de nouveaux alliages de titane à haute ductilité et fort écrouissage*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI. [Cité pages 9 et 11.]
- BROZEK, C., SUN, F., VERMAUT, P., MILLET, Y., LENAIN, A. et PRIMA, F. (2016). *Development of New Trip/Twip Titanium Alloys Combining High Strength, High Strain Hardening and Improved Ductility*, chapitre 147, pages 865–868. John Wiley & Sons, Ltd. [Cité page 10.]
- BURGERS, W. G. (1934). On the process of transition of the cubic-body-centered modification into the hexagonal-close-packed modification of zirconium. *Physica*, 1(7-12):561–586. [Cité page 15.]
- CAHN, R. W. (1954). Twinned crystals. *Advances in Physics*, 3(12):363–445. [Cité page 16.]
- CASTANY, P., YANG, Y., BERTRAND, E. et GLORANT, T. (2016). Reversion of a parent $\{130\}\langle 310 \rangle_{\alpha''}$ martensitic twinning system at the origin of $\{332\}\langle 113 \rangle_{\beta}$ twins observed in metastable β titanium alloys. *Phys. Rev. Lett.*, 117:245501. [Cité pages 20 et 21.]
- CHARVE, L. (1880). De la réduction des formes quadratiques ternaires positives et de son application aux irrationnelles du troisième degré. *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure*, 2e série, 9:3–156. [Cité page 161.]

- CHO, K., MORIOKA, R., HARJO, S., KAWASAKI, T. et YASUDA, H. Y. (2020). Study on formation mechanism of $\{332\}\langle 113\rangle$ deformation twinning in metastable β -type Ti alloy focusing on stress-induced α'' martensite phase. *Scripta Materialia*, 177:106 – 111. [Cité pages 21 et 23.]
- CHRISTIAN, J. W. et MAHAJAN, S. (1995). Deformation twinning. *Progress in Materials Science*, 39(1-2):1–157. [Cité page 16.]
- CLAYTON, J. (2018). Mesoscale models of interface mechanics in crystalline solids : a review. *Materials Science*, 53:5515–5545. [Cité page 28.]
- CLAYTON, J. et KNAP, J. (2011a). A phase field model of deformation twinning : Nonlinear theory and numerical simulations. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 240(9-10):841–858. [Cité pages 28, 42, 66, 80, 130, et 146.]
- CLAYTON, J. et KNAP, J. (2011b). Phase field modeling of twinning in indentation of transparent crystals. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*, 19:085005–1–31. [Cité pages 28 et 29.]
- CLAYTON, J. et KNAP, J. (2013). Phase-field analysis of fracture-induced twinning in single crystals. *Acta Materialia*, 61:5341–5353. [Cité page 29.]
- CLAYTON, J. et KNAP, J. (2015). Nonlinear phase field theory for fracture and twinning with analysis of simple shear. *Philosophical Magazine*, 95(24):2661–2696. [Cité page 29.]
- CONTI, S. et ZANZOTTO, G. (2004). A variational model for reconstructive phase transformations in crystals, and their relation to dislocations and plasticity. *Archive for rational mechanics and analysis*, 173(1):69–88. [Cité pages 155, 159, 160, 161, 164, 165, 166, 167, 171, et 175.]
- COTTON, J. D., BRIGGS, R. D., BOYER, R. R., TAMIRISAKANDALA, S., RUSSO, P., SHCHETNIKOV, N. et FANNING, J. C. (2015). State of the Art in Beta Titanium Alloys for Airframe Applications. *JOM*, 67(6):1281–1303. [Cité pages 7 et 10.]
- COTTURA, M., APPOLAIRE, B., FINEL, A. et LE BOUAR, Y. (2014). Phase field study of acicular growth : Role of elasticity in widmanstatten structure. *Acta Materialia*, 72:200 – 210. [Cité pages 75 et 147.]
- CROCKER, A. G. (1962). Twinned martensite. *Acta Metallurgica*, 10(2):113–122. [Cité pages 17, 18, 19, et 20.]
- DANARD, Y. (2019). *Développement d'alliages de titane transformables par déformation : étude des relations microstructure/propriétés mécaniques*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure de Chimie de Paris. [Cité pages 9, 10, 11, et 23.]
- DAVIS, R., FLOWER, H. et WEST, D. (1979). The decomposition of Ti-Mo alloy martensites by nucleation and growth and spinodal mechanisms. *Acta Metallurgica*, 27(6):1041 – 1052. [Cité page 8.]
- DE FONTAINE, D. (1970). Mechanical instabilities in the bcc lattice and the beta to omega phase transformation. *Acta Metallurgica*, 18:275–279. [Cité page 13.]

- DE FONTAINE, D., PATON, N. et WILLIAMS, J. (1971). The omega phase transformation in titanium alloys as an example of displacement controlled reactions. *Acta Metallurgica*, 19(11):1153–1162. [Cité page 9.]
- DE LAGRANGE, J. L. (1773). Recherches d'arithmétique. *Nouveaux Mémoires de l'Académie de Berlin*. [Cité page 163.]
- DENOUAL, C., CAUCCI, A., SOULARD, L. et PELLEGRINI, Y.-P. (2010). Phase-field reaction-pathway kinetics of martensitic transformations in a model Fe₃Ni alloy. *Physical Review Letters*, 105:035703–1–4. [Cité page 29.]
- DENOUAL, C. et VATTRÉ, A. (2016). A phase field approach with a reaction pathways-based potential to model reconstructive martensitic transformations with a large number of variants. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 90:91–107. [Cité pages 29, 158, 160, 161, et 162.]
- DUERIG, T., ALBRECHT, J., RICHTER, D. et FISCHER, P. (1982). Formation and reversion of stress induced martensite in Ti-10v-2fe-3al. *Acta Metallurgica*, 30(12):2161 – 2172. [Cité page 15.]
- EISENLOHR, P., DIEHL, M., LEBENSOHN, R. A. et ROTERS, F. (2013). A spectral method solution to crystal elasto-viscoplasticity at finite strains. *International Journal of Plasticity*, 46:37–53. [Cité pages 90, 91, 92, et 112.]
- EL-DANAF, E., KALIDINDI, S. R. et DOHERTY, R. D. (1999). Influence of grain size and stacking-fault energy on deformation twinning in fcc metals. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 30(5): 1223–1233. [Cité page 16.]
- ENGEL, P. (1986). *Geometric crystallography : an axiomatic introduction to crystallography*. D. Reidel; Kluwer Academic Publishers, Dordrecht ; Boston : Norwell, MA, U.S.A. [Cité pages 161 et 163.]
- ERICKSEN, J. L. (1989). Weak martensitic transformations in bravais lattices. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 107(1):23–36. [Cité page 159.]
- ERICKSEN, J. L. (2008). On the Cauchy-Born rule. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 13(3-4):199–220. [Cité page 158.]
- ESHELBY, J. D. (1957). The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 241(1226):376–396. [Cité pages 60 et 106.]
- FAN, D. et CHEN, L.-Q. (1997). Computer simulation of grain growth using a continuum field model. *Acta Materialia*, 45(2):611–622. [Cité page 145.]
- FENG, B. et WIDOM, M. (2018). Band structure theory of the bcc to hcp Burgers distortion. *Physical Review B*, 98:174108. [Cité page 30.]
- FINEL, A., LE BOUAR, Y., DABAS, B., APPOLAIRE, B., YAMADA, Y. et MOHRI, T. (2018). Sharp phase field method. *Phys. Rev. Lett.*, 121:025501. [Cité pages 57, 155, et 174.]

- FINEL, A., LE BOUAR, Y., GAUBERT, A. et SALMAN, U. (2010). Méthodes de champs de phase : Microstructures, propriétés mécaniques et complexité. *Comptes Rendus Physique*, 11(3-4):245–256. [Cité pages 28 et 32.]
- FROMMEYER, G., BRÜX, U. et NEUMANN, P. (2003). Supra-ductile and high-strength manganese-TRIP/TWIP steels for high energy absorption purposes. *ISIJ International*, 43(3):438–446. [Cité page 10.]
- FURUHARA, T., KISHIMOTO, K. et MAKI, T. (1994). Transmission electron microscopy of $\{332\}\langle 113\rangle$ deformation twin in Ti–15V–3Cr–3Sn–3Al alloy. *Materials Transactions, JIM*, 35(12):843–850. [Cité page 12.]
- GAO, J., HUANG, Y., GUAN, D., KNOWLES, A. J., MA, L., DYE, D. et RAINFORTH, W. M. (2018). Deformation mechanisms in a metastable beta titanium twinning induced plasticity alloy with high yield strength and high strain hardening rate. *Acta Materialia*, 152:301 – 314. [Cité page 12.]
- GROSDIDIER, T. et PHILIPPE, M. J. (2000). Deformation induced martensite and superelasticity in a β -metastable titanium alloy. *Materials Science and Engineering A*, 291(1):218–223. [Cité page 15.]
- GROSSE-KUNSTLEVE, R. W., SAUTER, N. K. et ADAMS, P. D. (2004). Numerically stable algorithms for the computation of reduced unit cells. *Acta Crystallographica Section A : Foundations of Crystallography*, 60(1):1–6. [Cité page 165.]
- GU, Y., CHEN, L.-Q., HEO, T. W., SANDOVAL, L. et BELAK, J. (2013). Phase field model of deformation twinning in tantalum : Parameterization via molecular dynamics. *Scripta Materialia*, 68(7):451–454. [Cité pages 27, 28, 29, 42, 47, 66, 68, 69, 80, et 130.]
- GUTIERREZ-URRUTIA, I., LI, C., JI, X., EMURA, S. et TSUCHIYA, K. (2018). Quantitative analysis of $\{332\}\langle 113\rangle$ twinning in a Ti-15Mo alloy by in situ scanning electron microscopy. *Science and Technology of Advanced Materials*, 19(1):474–483. [Cité page 23.]
- HANADA, S. et IZUMI, O. (1986). Transmission electron microscopic observations of mechanical twinning in metastable beta titanium alloys. *Metallurgical Transactions A*, 17(8):1409–1420. [Cité page 14.]
- HANADA, S., OZEKI, M. et IZUMI, O. (1985). Deformation characteristics in β phase Ti-Nb alloys. *Metallurgical Transactions A*, 16(5):789–795. [Cité pages 12, 13, et 14.]
- HANADA, S., YOSHIO, T. et IZUMI, O. (1986). Plastic deformation mode of retained β phase in β -eutectoid Ti-Fe alloys. *Journal of materials science*, 21(3):866–870. [Cité pages 12 et 13.]
- HATT, B. et ROBERTS, J. (1960). The ω -phase in zirconium base alloys. *Acta Metallurgica*, 8:575–. [Cité pages 12 et 14.]
- HEO, T. W., SHIH, D. S. et CHEN, L.-Q. (2014). Kinetic Pathways of Phase Transformations in Two-Phase Ti Alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 45(8):3438–3445. [Cité page 130.]

- HEO, T. W., WANG, Y., BHATTACHARYA, S., SUN, X., HU, S. et CHEN, L. Q. (2011). A phase-field model for deformation twinning. *Philosophical Magazine Letters*, 91(2):110–121. [Cité pages 2, 27, 28, 29, 36, 42, 43, 66, 68, 69, et 80.]
- HICKMAN, B. (1969). The formation of omega phase in titanium and zirconium alloys : A review. *Journal of Materials Science*, 4(6):554–563. [Cité page 9.]
- HOSODA, H., TAHARA, M., OKANO, N. et INAMURA, T. (2017). Plastic deformation behaviour of single-crystalline martensite of Ti-Nb shape memory alloy. *Scientific Reports*, 7(1):15715. [Cité page 9.]
- HSIUNG, L. M. et LASSILA, D. H. (2000). Shock-induced deformation twinning and omega transformation in tantalum and tantalum-tungsten alloys. *Acta Materialia*, 48(20):4851–4865. [Cité pages 18 et 19.]
- HU, S., HENAGER, C. H. et CHEN, L. (2010). Simulations of stress-induced twinning and de-twinning : A phase field model. *Acta Materialia*, 58(19):6554–6564. [Cité page 27.]
- INAMURA, T., KIM, J. I., KIM, H. Y., HOSODA, H., WAKASHIMA, K. et MIYAZAKI, S. (2007). Composition dependent crystallography of α'' -martensite in Ti-Nb-based β -titanium alloy. *Philosophical Magazine*, 87(23):3325–3350. [Cité page 15.]
- ISHIYAMA, S., HANADA, S. et IZUMI, O. (1991). Effect of Zr, Sn and Al Additions on Deformation Mode and Beta Phase Stability of Metastable Beta Ti Alloys. *ISIJ International*, 31(8):807–813. [Cité page 11.]
- JAMIESON, J. C. (1963). Crystal structures of titanium, zirconium, and hafnium at high pressures. *Science*, 140(3562):72–73. [Cité page 6.]
- JAYARAMAN, A., KLEMENT, W. et KENNEDY, G. C. (1963). Solid-solid transitions in titanium and zirconium at high pressures. *Phys. Rev.*, 131:644–649. [Cité page 6.]
- JI, X., GUTIERREZ-URRUTIA, I., EMURA, S., LIU, T., HARA, T., MIN, X., PING, D. et TSUCHIYA, K. (2019). Twinning behavior of orthorhombic- α'' martensite in a Ti-7.5Mo alloy. *Science and Technology of Advanced Materials*, 20(1):401–411. [Cité page 23.]
- JIN, Y. et WENG, G. (2002). A direct method for the crystallography of martensitic transformation and its application to TiNi and AuCd. *Acta Materialia*, 50:2967–2987. [Cité page 25.]
- JOHNSON, W. et CAHN, J. (1984). Elastically induced shape bifurcations of inclusions. *Acta metallurgica*, 32(11):1925–1933. [Cité page 66.]
- KABEL, M., BÖHLKE, T. et SCHNEIDER, M. (2014). Efficient fixed point and Newton–Krylov solvers for FFT-based homogenization of elasticity at large deformations. *Computational Mechanics*, 54(6):1497–1514. [Cité pages 91, 93, 95, 96, 102, 112, et 174.]
- KARASEVSKAYA, O. P., IVASISHIN, O. M., SEMIATIN, S. L. et MATVIYCHUK, Y. V. (2003). Deformation behavior of beta-titanium alloys. *Materials Science and Engineering A*, 354(1-2):121–132. [Cité page 15.]

- KHACHATURYAN, A. G. (1983). *Theory of structural transformation in solids*. John Wiley and Sons, New York, NY. [Cité pages 57 et 77.]
- KIM, H., WEI, L., KOBAYASHI, S., TAHARA, M. et MIYAZAKI, S. (2013). Nanodomain structure and its effect on abnormal thermal expansion behavior of a Ti-23Nb-2Zr-0.7Ta-1.2O alloy. *Acta Materialia*, 61:4874-4886. [Cité page 20.]
- KOLLI, R. et DEVARAJ, A. (2018). A review of metastable beta titanium alloys. *Metals*, 8(7):506. [Cité pages 7 et 9.]
- KOLLI, R. P., JOOST, W. J. et ANKEM, S. (2015). Phase Stability and Stress-Induced Transformations in Beta Titanium Alloys. *JOM*, 67(6):1273-1280. [Cité page 7.]
- KONDO, R., TADANO, Y. et SHIZAWA, K. (2014). A phase-field model of twinning and detwinning coupled with dislocation-based crystal plasticity for HCP metals. *Computational Materials Science*, 95:672-683. [Cité page 29.]
- KŘIVÝ, I. et GRUBER, B. (1976). A unified algorithm for determining the reduced (niggli) cell. *Acta Crystallographica Section A : Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*, 32(2):297-298. [Cité page 165.]
- LAFOURCADE, P., DENOUAL, C. et MAILLET, J.-B. (2019). Mesoscopic constitutive law with nonlinear elasticity and phase transformation for the twinning-buckling of tatb under dynamic loading. *Phys. Rev. Materials*, 3:053610. [Cité page 29.]
- LAGERLÖF, K. P. (1993). On deformation twinning in b.c.c. metals. *Acta Metallurgica Et Materialia*, 41(7):2143-2151. [Cité page 16.]
- LAHEURTE, P., EBERHARDT, A. et PHILIPPE, M. J. (2005). Influence of the microstructure on the pseudoelasticity of a metastable beta titanium alloy. *Materials Science and Engineering A*, 396(1-2):223-230. [Cité page 8.]
- LAI, M. J., TASAN, C. C. et RAABE, D. (2016). On the mechanism of {332} twinning in metastable β titanium alloys. *Acta Materialia*, 111:173-186. [Cité pages 14, 15, 16, 21, 66, et 145.]
- LAI, M. J., TASAN, C. C., ZHANG, J., GRABOWSKI, B., HUANG, L. F. et RAABE, D. (2015). Origin of shear induced β to ω transition in Ti-Nb-based alloys. *Acta Materialia*, 92:55-63. [Cité pages 13 et 14.]
- LANDAU, L. et LIFSHITZ, E. (1990). *Physique théorique / L. Landau, E. Lifchitz; [traduit du russe par V. Kolimeev]. Tome 7. Théorie de l'élasticité*. Physique théorique. Éditions Mir, Moscou, 2e édition révisée et complétée édition. [Cité page 106.]
- LANGER, J. (1992). An introduction to the kinetics of first-order phase transitions. *Solids far from Equilibrium*. [Cité pages 47 et 49.]
- LEBBAD, H. (2018). *Modélisation de la croissance des structures de Widmanstätten par la méthode des champs de phase*. Thèse de doctorat, Sorbonne Université. [Cité pages 47 et 75.]

- LEBENSOHN, R. et TOMÉ, C. (1993). A study of the stress state associated with twin nucleation and propagation in anisotropic materials. *Philosophical Magazine A*, 67(1):187–206. [Cité pages 59 et 132.]
- LEE, J. et YOO, M. (1990). Elastic strain energy of deformation twinning in tetragonal crystals. *Metallurgical Transactions A*, 21(9):2521–2530. [Cité pages 59, 62, 66, et 132.]
- LEJEUNE DIRICHLET, G. (1850). Über die reduction der positiven quadratischen formen mit drei unbestimmten ganzen zahlen. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 40:209–227. [Cité page 163.]
- LEVITAS, V. I., LEE, D. W. et PRESTON, D. L. (2010). Interface propagation and microstructure evolution in phase field models of stress-induced martensitic phase transformations. *International Journal of Plasticity*, 26(3):395–422. [Cité page 27.]
- LI, C.-x., LUO, H.-b., HU, Q.-m., YANG, R., YIN, F.-x. et UMEZAWA, O. (2013). Lattice parameters and relative stability of a α'' phase in binary titanium alloys from first-principles calculations. *Solid State Communications*, 159:70–75. [Cité page 15.]
- LIANG, Q., KLOENNE, Z., ZHENG, Y., WANG, D., ANTONOV, S., GAO, Y., HAO, Y., YANG, R., WANG, Y. et FRASER, H. (2020). The role of nano-scaled structural non-uniformities on deformation twinning and stress-induced transformation in a cold rolled multifunctional β -titanium alloy. *Scripta Materialia*, 177:181–185. [Cité pages 20 et 21.]
- LILENSTEN, L., DANARD, Y., BROZEK, C., MANTRI, S., CASTANY, P., GLORANT, T., VERMAUT, P., SUN, F., BANERJEE, R. et PRIMA, F. (2019). On the heterogeneous nature of deformation in a strain-transformable beta metastable Ti-V-Cr-Al alloy. *Acta Materialia*, 162:268–276. [Cité pages 11, 16, et 23.]
- LITVINOV, V. et RUSAKOV, G. (2000). Twinning on the $\{332\}\langle 113 \rangle$ system in unstable β titanium alloys. *The Physics of Metals and Metallography*, 90(SUPPL. 1). [Cité page 19.]
- LITVINOV, V. S., POPOV, A. A., LITVINOV, A. V. et ELKINA, O. A. (1997). Deformation induced twins (332) in titanium beta-alloys. *Fizika Metallov i Metallovedenie*, 83(5):152–160. [Cité page 19.]
- LIU, C., SHANTHRAJ, P., DIEHL, M., ROTERS, F., DONG, S., DONG, J., DING, W. et RAABE, D. (2018a). An integrated crystal plasticity–phase field model for spatially resolved twin nucleation, propagation, and growth in hexagonal materials. *International Journal of Plasticity*, 106:203 – 227. [Cité pages 29 et 37.]
- LIU, H., LIN, F., ZHAO, P., MOELANS, N., WANG, Y. et NIE, J. (2018b). Formation and autocatalytic nucleation of co-zone $\{101\bar{2}\}$ deformation twins in polycrystalline Mg : A phase field simulation study. *Acta Materialia*, 153:86 – 107. [Cité pages 27, 28, et 80.]
- LÜTJERING, G. et WILLIAMS, J. C. (2007). *Titanium*. Springer Science & Business Media. [Cité page 7.]
- MAHAJAN, S. (1975). Interrelationship between slip and twinning in B.C.C. crystals. *Acta Metallurgica*, 23(6):671–684. [Cité page 18.]

- MARTELEUR, M. (2017). *On the plasticity mechanisms of β metastable Ti alloys, towards enhanced work hardening*. Thèse de doctorat, Université catholique de Louvain. [Cité pages 22 et 23.]
- MARTELEUR, M., SUN, F., GLORIAN, T., VERMAUT, P., JACQUES, P. J. et PRIMA, F. (2012). On the design of new β -metastable titanium alloys with improved work hardening rate thanks to simultaneous TRIP and TWIP effects. *Scripta Materialia*, 66(10):749–752. [Cité pages 10, 13, 14, 15, et 18.]
- MARTIN, G. (2017). *Simulation numérique multi-échelles du comportement mécanique des alliages de titane β -métastable Ti5553 et Ti17*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des Mines de Paris. [Cité page 51.]
- MCQUILLAN, M. K. (1963). Phase transformations in titanium and its alloys. *Metallurgical Reviews*, 8(1):41–104. [Cité page 6.]
- MIN, X. H., TSUZAKI, K., EMURA, S., SAWAGUCHI, T., I, S. et TSUCHIYA, K. (2013). $\{332\} \langle 11\bar{3} \rangle$ twinning system selection in a β -type Ti-15Mo-5Zr polycrystalline alloy. *Materials Science and Engineering A*, 579:164–169. [Cité pages 59 et 132.]
- MOELANS, N., BLANPAIN, B. et WOLLANTS, P. (2008). An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution. *Calphad*, 32(2):268–294. [Cité page 36.]
- MOULINEC, H. et SUQUET, P. (1998). A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 157(1-2):69–94. [Cité pages 44, 91, et 182.]
- MURA, T. (1987). *Micromechanics of defects in solids*, volume 3. Springer Netherlands. [Cité pages 60 et 106.]
- NEJEZCHLEBOVÁ, J., JANOVSKÁ, M., SEDLÁK, P., ŠMILAUEROVÁ, J., STRÁSKÝ, J., JANEČEK, M. et SEINER, H. (2019). Elastic constants of β -Ti15Mo. *Journal of Alloys and Compounds*, 792:960 – 967. [Cité page 127.]
- NEMIROVSKII, Y. R. (1998). On the possibility of martensitic origin of $\{332\}$ twins in $\beta + \omega$ titanium alloys. *Physics of metals and metallography*, 86(1):20–26. [Cité pages 13, 14, et 20.]
- NIGGLI, P. (1928). *Krystallographische und strukturtheoretische Grundbegriffe*, volume 1. Akademische verlagsgesellschaft mbh. [Cité page 166.]
- NIINOMI, M., HATTORI, T., MORIKAWA, K., KASUGA, T., SUZUKI, A., FUKUI, H. et NIWA, S. (2002). Development of low rigidity β -type titanium alloy for biomedical applications. *Materials Transactions*, 43(12):2970–2977. [Cité page 10.]
- OKA, M. et TANIGUCHI, Y. (1980). Crystallography of stress-induced products in metastable beta Ti-Mo alloys. *Titanium*, 80:1–4. [Cité page 145.]
- OLSON, G. B. et AZRIN, M. (1978). Transformation behavior of TRIP steels. *Metallurgical Transactions A*, 9(5):713–721. [Cité page 15.]

- PARADKAR, A., KAMAT, S. V., GOGIA, A. K. et KASHYAP, B. P. (2008). Effect of Al and Nb on the trigger stress for stress-induced martensitic transformation during tensile loading in Ti-Al-Nb alloys. *Materials Science and Engineering A*, 487(1-2):14–19. [Cité page 15.]
- PARIS, H. G., LEFEVRE, B. G. et STARKE, E. A. (1976). Deformation behavior in quenched and aged beta Ti-V alloys. *Metallurgical Transactions A*, 7(2):273–278. [Cité page 19.]
- PETERS, M., KUMPFERT, J., WARD, C. H. et LEYENS, C. (2003). Titanium alloys for aerospace applications. *Advanced Engineering Materials*, 5(6):419–427. [Cité page 9.]
- PI, Z., FANG, Q., LIU, B., FENG, H., LIU, Y., LIU, Y. et WEN, P. (2016). A phase field study focuses on the transverse propagation of deformation twinning for hexagonal-closed packed crystals. *International Journal of Plasticity*, 76:130–146. [Cité page 28.]
- POLMEAR, I., STJOHN, D., NIE, J.-F. et QIAN, M. (2017). *Light alloys : metallurgy of the light metals*. Butterworth-Heinemann. [Cité page 8.]
- PORTER, D. A., EASTERLING, K. E. et SHERIF, M. (2009). *Phase Transformations in Metals and Alloys, (Revised Reprint)*. CRC press. [Cité page 47.]
- PRIESTNER, R. et LESLIE, W. C. (1965). Nucleation of deformation twins at slip plane intersections in B.C.C. metals. *Philosophical Magazine*, 11(113):895–916. [Cité page 18.]
- QIAN, B. (2018). *Transformations martensitiques dans des alliages de titane pour des dispositifs biomédicaux*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure de Chimie de Paris. [Cité page 13.]
- RAMAROLAHY, A., CASTANY, P., PRIMA, F., LAHEURTE, P., PÉRON, I. et GLORANT, T. (2012). Microstructure and mechanical behavior of superelastic Ti–24Nb–0.5 O and Ti–24Nb–0.5 N biomedical alloys. *Journal of the mechanical behavior of biomedical materials*, 9:83–90. [Cité page 9.]
- RUFFINI, A., LE BOUAR, Y. et FINEL, A. (2017). Three-dimensional phase-field model of dislocations for a heterogeneous face-centered cubic crystal. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 105:95–115. [Cité pages 112 et 174.]
- RUSAKOV, G. M., LITVINOV, A. V. et LITVINOV, V. S. (2006). Deformation twinning of titanium β -alloys of transition class. *Metal science and heat treatment*, 48(5-6):244–251. [Cité pages 18 et 19.]
- SADEGHPOUR, S., ABBASI, S. M. et MORAKABATI, M. (2015). Deformation-induced martensitic transformation in a new metastable β titanium alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, 650:22–29. [Cité page 16.]
- SALMAN, O. U. (2009). *Modeling of spatio-temporal dynamics and patterning mechanisms of martensites by phase-field and lagrangian methods*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie. [Cité pages 81, 144, et 158.]
- SALMAN, O. U. et BAGGIO, R. (2019). *Homogeneous Dislocation Nucleation in Landau Theory of Crystal Plasticity*, chapitre 1, pages 1–24. John Wiley & Sons, Ltd. [Cité pages 164 et 175.]

- SALMAN, O. U., FINEL, A., DELVILLE, R. et SCHRYVERS, D. (2012a). The role of phase compatibility in martensite. *Journal of Applied Physics*, 111(10). [Cité page 27.]
- SALMAN, O. U., FINEL, A., DELVILLE, R. et SCHRYVERS, D. (2012b). The role of phase compatibility in martensite. *Journal of Applied Physics*, 111(10):103517. [Cité page 158.]
- SALMAN, O. U., MUIITE, B. et FINEL, A. (2019). Origin of stabilization of macrotwin boundaries in martensites. *The European Physical Journal B*, 92(1):20. [Cité page 81.]
- SANATI, M., SAXENA, A. et LOOKMAN, T. (2001). Domain wall modeling of bcc to hcp reconstructive phase transformation in early transition metals. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 64(9):7–10. [Cité page 30.]
- SASS, S. (1969). The ω phase in a Zr-25 at.% Ti alloy. *Acta Metallurgica*, 17(7):813–820. [Cité page 12.]
- SEEBER, L. A. (1831). *Untersuchungen über die Eigenschaften der positiven Ternaeren quadratischen Formen...* Gedruckt mit Wagner. [Cité pages 163 et 166.]
- SEMIATIN, S., SEETHARAMAN, V. et WEISS, I. (1997). The thermomechanical processing of alpha/beta titanium alloys. *JOM*, 49(6):33–39. [Cité page 8.]
- SENKOV, O., CHAKOUMAKOS, B., JONAS, J. et FROES, F. (2001). Effect of temperature and hydrogen concentration on the lattice parameter of beta titanium. *Materials research bulletin*, 36(7-8):1431–1440. [Cité page 6.]
- SHANTHRAJ, P., SHARMA, L., SVENDSEN, B., ROTERS, F. et RAABE, D. (2016). A phase field model for damage in elasto-viscoplastic materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 312:167–185. [Cité page 37.]
- SIKKA, S. K., VOHRA, Y. K. et CHIDAMBARAM, R. (1982). Omega phase in materials. *Progress in Materials Science*, 27(3):245–310. [Cité page 6.]
- SPEAROT, D., TAUPIN, V., DANG, K. et CAPOLUNGO, L. (2020). Structure and kinetics of three-dimensional defects on the $\{101\bar{2}\}$ twin boundary in magnesium : Atomistic and phase-field simulations. *Mechanics of Materials*, 143:103314. [Cité pages 28 et 29.]
- STERNBERG, S. (1995). *Group theory and physics*. Cambridge University Press. [Cité page 161.]
- SUN, F., ZHANG, J. Y., MARTELEUR, M., BROZEK, C., RAUCH, E. F., VERON, M., VERMAUT, P., JACQUES, P. J. et PRIMA, F. (2015). A new titanium alloy with a combination of high strength, high strain hardening and improved ductility. *Scripta Materialia*, 94:17–20. [Cité pages 9, 13, 15, et 16.]
- SUN, F., ZHANG, J. Y., MARTELEUR, M., GLORANT, T., VERMAUT, P., LAILLÉ, D., CASTANY, P., CURFS, C., JACQUES, P. J. et PRIMA, F. (2013). Investigation of early stage deformation mechanisms in a metastable β titanium alloy showing combined twinning-induced plasticity and transformation-induced plasticity effects. *Acta Materialia*, 61(17):6406–6417. [Cité pages 11, 13, 14, 22, et 23.]

- SUZUKI, H. et BARRETT, C. S. (1958). Deformation twinning in silver-gold alloys. *Acta Metallurgica*, 6(3):156–165. [Cité page 16.]
- TAKEMOTO, Y., HIDA, M. et SAKAKIBARA, A. (1993). Structural relaxation of interface of {332} <113> twin in β -Ti alloy. *Nippon Kinzoku Gakkaishi*. [Cité page 19.]
- TANE, M., AKITA, S., NAKANO, T., HAGIHARA, K., UMAKOSHI, Y., NIINOMI, M. et NAKAJIMA, H. (2008). Peculiar elastic behavior of Ti–Nb–Ta–Zr single crystals. *Acta Materialia*, 56(12):2856 – 2863. [Cité page 127.]
- TAYLOR, G. I. et ELAM, C. F. (1926). The distortion of iron crystals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 112(761):337–361. [Cité page 11.]
- TOBE, H., KIM, H. Y., INAMURA, T., HOSODA, H. et MIYAZAKI, S. (2014). Origin of {332} twinning in metastable β -Ti alloys. *Acta Materialia*, 64:345–355. [Cité pages 17, 19, 20, et 154.]
- TORABI, S., LOWENGRUB, J., VOIGT, A. et WISE, S. (2009). A new phase-field model for strongly anisotropic systems. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 465(2105):1337–1359. [Cité pages 70 et 80.]
- VALDENNAIRE, P.-L. (2016). *Crystal plasticity : Transport equation and dislocation density*. Thèse de doctorat, École nationale supérieure des mines de Paris. [Cité pages 106, 109, et 112.]
- VEIGA, C., LOUREIRO, A. et DAVIM, J. (2012). Properties and applications of titanium alloys. *Reviews on Advanced Materials Science*, 32:s. 133–148. [Cité pages 7 et 9.]
- VOHRA, Y. K. et SPENCER, P. T. (2001). Novel γ -phase of titanium metal at megabar pressures. *Physical review letters*, 86(14):3068. [Cité page 6.]
- WASILEWSKI, R. J. (1977). On the Origin of Mechanical Twinning– Deformation or Transformation? *Metallurgical Transactions A*, 8:391. [Cité page 20.]
- WECHSLER, M. (1959). On the theory of martensitic transformations. The generalized lattice invariant shear and the degeneracy of solutions for the cubic to tetragonal transformations. *Acta Metallurgica*, 7:793–802. [Cité page 25.]
- WEISS, I. et SEMIATIN, S. (1999). Thermomechanical processing of alpha titanium alloys—an overview. *Materials Science and Engineering : A*, 263(2):243 – 256. [Cité page 8.]
- WELSCH, G., BOYER, R. et COLLINGS, E. (1993). *Materials properties handbook : titanium alloys*. ASM international. [Cité page 7.]
- WILLIAMS, J. et BLACKBURN, M. (1969). The influence of misfit on the morphology and stability of the omega phase in titanium–transition metal alloys. Rapport technique, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif. [Cité page 9.]

- WU, X. L., YOUSSEF, K. M., KOCH, C. C., MATHAUDHU, S. N., KECSKÉS, L. J. et ZHU, Y. T. (2011). Deformation twinning in a nanocrystalline hcp Mg alloy. *Scripta Materialia*, 64(3):213–216. [Cité page 16.]
- XING, H. et SUN, J. (2008). Mechanical twinning and omega transition by $\langle 111 \rangle \{112\}$ shear in a metastable β titanium alloy. *Applied Physics Letters*, 93(3):111–114. [Cité pages 14 et 18.]
- YANG, Y., CASTANY, P., HAO, Y. et GLORANT, T. (2020). Plastic deformation via hierarchical nano-sized martensitic twinning in the metastable β Ti-24Nb-4Zr-8Sn alloy. *Acta Materialia*, 194:27–39. [Cité page 21.]
- YANG, Y., LI, G. P., CHENG, G. M., LI, Y. L. et YANG, K. (2009). Multiple deformation mechanisms of Ti-22.4Nb-0.73Ta-2.0Zr-1.34O alloy. *Applied Physics Letters*, 94(6):10–13. [Cité page 11.]
- YAO, T., DU, K., WANG, H., HUANG, Z., LI, C., LI, L., HAO, Y., YANG, R. et YE, H. (2017). In situ scanning and transmission electron microscopy investigation on plastic deformation in a metastable β titanium alloy. *Acta Materialia*, 133:21–29. [Cité page 11.]
- YOO, M. H. et LEE, J. K. (1991). Deformation twinning in h.c.p. metals and alloys. *Philosophical Magazine A*, 63(5):987–1000. [Cité page 16.]
- YU, H. Y. (2008). Strain-hardening behaviors of TRIP-assisted steels during plastic deformation. *Materials Science and Engineering A*, 479(1-2):333–338. [Cité page 15.]
- ZANZOTTO, G. (1996). The Cauchy–Born hypothesis, nonlinear elasticity and mechanical twinning in crystals. *Acta Crystallographica Section A : Foundations of Crystallography*, 52(6):839–849. [Cité pages 24, 158, et 165.]
- ZHANG, J. (2014). *Mechanical Behavior and Microstructural Evolution in Metastable β Ti-Mo Based Alloys with TRIP and TWIP Effects*. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie. [Cité page 8.]
- ZHANG, J. Y., LI, J. S., CHEN, Z., MENG, Q. K., SUN, F. et SHEN, B. L. (2017). Microstructural evolution of a ductile metastable β titanium alloy with combined TRIP/TWIP effects. *Journal of Alloys and Compounds*, 699:775–782. [Cité page 10.]
- ZHAO, X. F., NIINOMI, M., NAKAI, M., HIEDA, J., ISHIMOTO, T. et NAKANO, T. (2012). Optimization of Cr content of metastable beta-type Ti-Cr alloys with changeable Young's modulus for spinal fixation applications. *Acta Biomaterialia*, 8(6):2392–2400. [Cité page 9.]
- ZHENG, Y., WILLIAMS, R., NAG, S., BANERJEE, R., FRASER, H. et BANERJEE, D. (2016). The effect of alloy composition on instabilities in the β phase of titanium alloys. *Scripta Materialia*, 116:49–52. [Cité page 20.]
- ZHOU, X., MIN, X. a., EMURA, S. et TSUCHIYA, K. (2017). Accommodative $\{332\}\langle 113 \rangle$ primary and secondary twinning in a slightly deformed β -type Ti-Mo titanium alloy. *Materials Science and Engineering : A*, 684:456–465. [Cité pages 11, 59, 132, et 138.]

Modélisation par la méthode des champs de phase du maclage mécanique dans des alliages de titane beta-métastables

Les alliages de titane beta-métastables présentent des propriétés mécaniques remarquables à température ambiante, telles qu'une résistance spécifique à la traction et une déformation à la rupture élevées. Ces propriétés mécaniques sont liées à l'évolution sous contrainte de la microstructure. Un mode de déformation spécifique à ces alliages joue en particulier un rôle essentiel : il s'agit du système de maclage mécanique $\{332\}\langle 11-3 \rangle$. Ces travaux de thèse portent ainsi sur une modélisation, par la méthode des champs de phase, de l'évolution sous contrainte des variants de macles $\{332\}\langle 11-3 \rangle$.

Plusieurs formulations de l'énergie libre et de l'énergie élastique sont successivement analysées. Une première partie est consacrée à un modèle champ de phase de type Allen-Cahn avec prise en compte d'une élasticité dans un formalisme géométriquement linéaire. Ce modèle est utilisé avec une énergie d'interface isotrope ou anisotrope afin d'étudier l'influence de cette dernière sur la croissance et le degré d'anisotropie des variants de macles. Le rôle d'une élasticité formulée en grande déformation est ensuite discuté et donne lieu à la deuxième partie de ces travaux. Un algorithme de résolution de l'équilibre mécanique dans le formalisme géométriquement non-linéaire par méthode spectrale est alors mis en place et validé. Il est ensuite utilisé dans le développement d'un modèle champ de phase de type Allen-Cahn avec prise en compte d'une élasticité géométriquement non-linéaire. Nous procédons alors à une étude comparative fine des microstructures obtenues en géométries linéaire et non-linéaire.

Les résultats montrent une différence majeure entre les microstructures obtenues dans les deux cadres élastiques, concluant sur la nécessité d'une élasticité en grande déformation pour reproduire les microstructures de macles observées expérimentalement. Enfin, nous présentons une étude prospective d'un formalisme champ de phase plus général que les précédents, basé sur une méthode de réduction de Lagrange, qui permettrait de prendre en compte pleinement le caractère reconstructif du maclage et la nature hiérarchique des microstructures observées expérimentalement.

Mots-clés : ALLIAGES DE TITANE ; MICROSTRUCTURES SOUS CONTRAINTE ; MACLAGE MÉCANIQUE ; MÉTHODE DES CHAMPS DE PHASE ; ÉLASTICITÉ LINÉAIRE ; GÉOMÉTRIES LINÉAIRE ET NON-LINÉAIRE

Phase field modeling of deformation twinning in beta-metastable titanium alloys

Beta-metastable titanium alloys exhibit remarkable mechanical properties at room temperature, such as a high specific tensile strength and a high strain to rupture. These mechanical properties are linked to the microstructure evolution under stress. In particular, for these alloys, a specific deformation mode plays an essential role: the $\{332\}\langle 11-3 \rangle$ mechanical twinning system. This thesis work thus concerns a modeling, by the phase field method, of $\{332\}\langle 11-3 \rangle$ twin variants evolution under stress.

Several formulations of free energy and elastic energy are successively analyzed. The first part is devoted to an Allen-Cahn type phase field model with elastic energy taken into account in a geometrically linear formalism. This model is used with an isotropic or anisotropic interface energy in order to study the influence of the latter on the growth and the degree of anisotropy of twin variants. The role of an elasticity formulated in finite strain is then discussed and gives rise to the second part of this work. A mechanical equilibrium solver formulated in the geometrically non-linear formalism using a spectral method is then set up and validated. It is then used in the development of an Allen-Cahn type phase field model considering a geometrically non-linear elasticity. We then proceed to a fine comparative study of the microstructures obtained in linear and non-linear geometries.

The results show a major difference between the microstructures obtained in the two elastic frameworks, concluding on the need for a finite strain elasticity to reproduce the twin microstructures observed experimentally. Finally, we present a prospective study of a more general phase field formalism than the previous ones, based on a Lagrange reduction method, which would allow to fully take into account the reconstructive character of twinning and the hierarchical nature of the microstructures observed experimentally.

Keywords : TITANIUM ALLOYS ; MICROSTRUCTURES UNDER STRESS ; DEFORMATION TWINNING ; PHASE FIELD METHOD ; LINEAR ELASTICITY ; LINEAR AND NON-LINEAR GEOMETRIES

