



**HAL**  
open science

# Modélisation multi-échelles du comportement mécanique des alliages TiAl pour la prévision de leur tenue en fatigue

Pierre Serrano

► **To cite this version:**

Pierre Serrano. Modélisation multi-échelles du comportement mécanique des alliages TiAl pour la prévision de leur tenue en fatigue. Matériaux. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2020. Français. NNT : 2020TOU30272 . tel-03171635v2

**HAL Id: tel-03171635**

**<https://hal.science/tel-03171635v2>**

Submitted on 6 Jul 2021

**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

En vue de l'obtention du  
**DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE**

Délivré par l'Université Toulouse 3 - Paul Sabatier

---

Présentée et soutenue par

**Pierre SERRANO**

Le 9 octobre 2020

**Modélisation multi-échelles du comportement mécanique des alliages TiAl pour la prévision de leur tenue en fatigue**

---

Ecole doctorale : **SDM - SCIENCES DE LA MATIERE - Toulouse**

Spécialité : **Sciences et Génie des Matériaux**

Unité de recherche:

**CEMES - Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales**

Thèse dirigée par

**Alain COURET et Louise TOUALBI**

Jury

<b>M. Gilbert Hénaff</b>	Rapporteur
<b>M. Renald Brenner</b>	Rapporteur
<b>Mme Catherine Mabru</b>	Examinatrice
<b>M. Nicolas Saintier</b>	Examinateur
<b>M. Alain Couret</b>	Directeur de thèse
<b>Mme Louise Toualbi</b>	Co-directrice de thèse
<b>Mme Pascale Kanoute</b>	Encadrante
<b>M. Pierre Sallot</b>	Invité



*À mes grands-parents,*



# Remerciements

Ce travail a été financé par l'Office National d'Études de de Recherches Aérospatiales et réalisé dans le Département Matériaux et Structures en collaboration avec le Centre d'Élaboration de Matériaux et d'Études Structurales du CNRS.

Je souhaite en premier lieu remercier les membres du jury qui m'ont fait l'honneur d'évaluer mon travail et de se déplacer pour ma soutenance (ce qui n'avait rien d'évident en temps de pandémie pour les personnes lisant ces lignes à posteriori). Merci à Catherine Mabru d'avoir présidé le jury, Gilbert Hénaff et Renald Brenner d'avoir rapporté ce travail, et Nicolas Saintier et Pierre Sallot de l'avoir examiné.

Je tiens ensuite à remercier Alain Couret d'avoir accepté de diriger cette thèse malgré la distance. Cela a été un réel plaisir de travailler avec toi. Je remercie chaleureusement Louise Toualbi et Pascale Kanoute de m'avoir encadré au quotidien. Merci pour vos conseils, votre écoute, votre soutien, et pour m'avoir donné goût à la recherche. Jamais je n'aurais jamais cru quelques années auparavant pouvoir être fasciné par la métallurgie, la fatigue, les microstructures, les dislocations, et autres joyeusetés. Et pourtant.

Je souhaite également saluer mes collègues Camille Liard, Nicolas Horezan, Denis Boivin et Yves Renollet. Merci pour votre temps et votre contribution à la partie expérimentale de ce travail. Je remercie aussi toutes les personnes de l'Onera, du CEMES, et d'ailleurs, qui ont pu contribuer à cette thèse, ou tout simplement à une discussion autour d'un café. Je pense particulièrement à mes collègues du bâtiment E4.

Shout out à mes sœurs et frères d'armes doctorant.e.s sans qui ces années n'auraient pas été les mêmes. Mention spéciale au Chevalier de Tizi, à l'Aigle de Djerba, au Baron d'Hambourg, à la Duchesse Du Mascaret, au Comte de la Rochelle, et à Tibop.

Enfin, je tiens à remercier Anna, ma famille, et tout particulièrement mes parents qui m'ont permis d'en arriver là.



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>9</b>
<b>1 Étude bibliographique</b>	<b>13</b>
1.1 Les alliages TiAl : microstructures & propriétés mécaniques . . . . .	15
1.1.1 Diagramme de phase . . . . .	15
1.1.2 Phases cristallographiques et structure lamellaire . . . . .	16
1.1.3 Microstructures génériques & propriétés mécaniques élémentaires . . . . .	18
1.1.4 Déformation des phases constitutives des microstructures des alliages TiAl . . . . .	20
1.1.5 Lien microstructure-comportement mécanique des microstructures génériques des alliages TiAl : analyse d'études micromécaniques . . . . .	25
1.2 Fatigue des alliages TiAl . . . . .	29
1.2.1 Comportement mécanique des alliages TiAl sous sollicitations cycliques . . . . .	29
1.2.1.1 Analyse macroscopique . . . . .	29
1.2.1.2 Mécanismes de déformation . . . . .	30
1.2.2 Identification des sites et mécanismes d'amorçage de microfissures de fatigue . . . . .	31
1.2.2.1 Sites d'amorçage . . . . .	32
1.2.2.2 Analyse des mécanismes d'amorçage . . . . .	33
1.2.3 Propagation de fissures de fatigue . . . . .	34
1.2.4 Analyse de campagnes de fatigue . . . . .	35
1.3 Modélisation du comportement mécanique par calcul sur microstructure & applications aux alliages TiAl . . . . .	37
1.3.1 Généralités du calcul sur microstructure . . . . .	37
1.3.1.1 Description d'une microstructure . . . . .	37
1.3.1.2 Comportement local : loi de plasticité cristalline . . . . .	38
1.3.1.3 Identification des paramètres . . . . .	39
1.3.1.4 Paramètres influençant les résultats : VER, conditions limites & maillage . . . . .	40
1.3.1.5 Approche analytique : modèles à champs moyens . . . . .	40
1.3.2 Applications aux alliages TiAl . . . . .	41
1.3.2.1 Microstructure presque- $\gamma$ . . . . .	41
1.3.2.2 Microstructures lamellaires . . . . .	42
1.3.2.3 Microstructures duplex . . . . .	43
1.3.2.4 Brève comparaison avec d'autres familles de matériaux . . . . .	43
1.4 Approches multi-échelles pour l'étude de la tenue en fatigue . . . . .	43
1.4.1 Généralités sur la modélisation de la fatigue . . . . .	44
1.4.1.1 Principe général . . . . .	44
1.4.1.2 Exemples de modèles macroscopiques . . . . .	44
1.4.2 Étude de la tenue en fatigue à l'échelle de la microstructure . . . . .	45
1.4.2.1 Analyse aux valeurs extrêmes d'indicateurs de tenue en fatigue . . . . .	46



1.4.2.2	Exemples d'indicateurs de tenue en fatigue et des problématiques associées . . . . .	47
1.4.2.3	Lien avec une durée de vie . . . . .	49
1.5	Résumé des points clés & et de la démarche adoptée . . . . .	50
<b>2</b>	<b>Étude expérimentale multi-échelles du comportement mécanique des alliages TiAl</b>	<b>53</b>
2.1	Échelle macroscopique : étude expérimentale du comportement cyclique élasto-visco-plastique des alliages TiAl . . . . .	55
2.1.1	Matériau et microstructures . . . . .	55
2.1.2	Matrice d'essais mécaniques . . . . .	57
2.1.3	Analyse des boucles d'hystérésis : effet Bauschinger et caractéristiques du comportement cyclique . . . . .	60
2.1.4	Résultats de la campagne d'essais . . . . .	62
2.1.4.1	Essais à 20 °C . . . . .	62
2.1.4.2	Essais à 750 °C . . . . .	65
2.1.5	Analyse des résultats et lien avec les mécanismes de déformation . . . . .	68
2.1.6	Essais de fatigue-temps de maintien à 750 °C . . . . .	70
2.1.6.1	Chargement et méthode d'analyse . . . . .	70
2.1.6.2	Résultats & discussion . . . . .	72
2.1.7	Résumé intermédiaire des principaux résultats . . . . .	73
2.2	Échelle mésoscopique : étude de la localisation de la déformation dans les microstructures des alliages TiAl . . . . .	74
2.2.1	Moyens d'essais et corrélation d'images . . . . .	74
2.2.1.1	Platine d'essais et éprouvettes . . . . .	74
2.2.1.2	Corrélation d'images . . . . .	74
2.2.2	Étude de la localisation de la déformation dans une microstructure presque- $\gamma$ : essai <i>in situ</i> MEB . . . . .	76
2.2.2.1	Mouchetis et conditions d'acquisition . . . . .	76
2.2.2.2	Analyse de la déformation dans les microstructures presque- $\gamma$ . . . . .	77
2.2.3	Étude de la déformation dans une microstructure totalement-lamellaire : essais sous moyens optiques . . . . .	79
2.2.3.1	Moyens d'acquisition & caractérisation du comportement mécanique . . . . .	79
2.2.3.2	Analyse de la déformation dans les microstructures totalement-lamellaires . . . . .	82
2.2.3.3	Discussion . . . . .	87
2.3	Résumé des résultats expérimentaux . . . . .	87
<b>3</b>	<b>Définition du modèle de plasticité cristalline : modélisation du comportement de monocolonies lamellaires</b>	<b>89</b>
3.1	Présentation du modèle de plasticité cristalline et des transitions d'échelles . . . . .	90
3.1.1	Choix vis-à-vis de l'étude bibliographique et des résultats expérimentaux . . . . .	90
3.1.2	Évaluation de la plasticité : modèle de Méric-Cailletaud . . . . .	91
3.1.3	Transition d'échelle analytique pour l'évaluation de la plasticité à l'échelle des lamelles . . . . .	92
3.2	Paramètres du modèle : phases monolithiques . . . . .	94
3.2.1	Phase $\gamma$ . . . . .	95
3.2.2	Phase $\alpha_2$ . . . . .	97
3.2.3	Phase $\beta_0$ . . . . .	97
3.2.4	Lois d'écroissage . . . . .	98

3.3	Paramètres du modèle : le cas des colonies lamellaires . . . . .	98
3.3.1	Déformation des colonies lamellaires : étude des monocolonies . . . . .	98
3.3.2	Définition du multicouche & des systèmes de glissement . . . . .	101
3.3.3	Définition des paramètres à identifier à partir des essais sur monocristaux . . . . .	102
3.3.4	Résultats & discussion . . . . .	103
3.3.5	Transfert des paramètres vers le cas du polycristal et à 750 °C . . . . .	105
3.4	Résumé des points principaux . . . . .	107
<b>4</b>	<b>Modélisation du comportement mécanique des alliages TiAl par calcul éléments finis sur microstructure et homogénéisation numérique</b>	<b>111</b>
4.1	Génération de microstructures virtuelles & calcul sur microstructures . . . . .	113
4.1.1	Génération de microstructures virtuelles avec Neper . . . . .	113
4.1.2	Homogénéisation numérique : conditions limites & maillage . . . . .	114
4.1.3	Définition de la taille du VER . . . . .	115
4.2	Modélisation des essais micromécaniques . . . . .	116
4.2.1	Identification des paramètres par calcul éléments finis et homogénéisation numérique . . . . .	117
4.2.2	Modèle éléments finis de l'éprouvette : maillage & conditions aux limites . . . . .	119
4.2.3	Résultats & discussion . . . . .	121
4.2.4	Remarque concernant le comportement des grains $\gamma$ . . . . .	125
4.3	Modélisation du comportement des quatre microstructures génériques . . . . .	125
4.3.1	Génération des microstructures statistiquement représentatives . . . . .	125
4.3.2	Modélisation du comportement cyclique : identification des paramètres . . . . .	129
4.3.2.1	Démarche proposée pour l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline . . . . .	129
4.3.2.2	Résultats . . . . .	130
4.3.3	Discussion & perspectives . . . . .	136
4.4	Synthèse des résultats . . . . .	137
<b>5</b>	<b>Étude de la fatigue des alliages TiAl par l'analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue</b>	<b>139</b>
5.1	Analyse de la tenue en fatigue des microstructures génériques des alliages TiAl . . . . .	140
5.1.1	Méthodologie et démarche . . . . .	140
5.1.1.1	Définition du plan d'expérience virtuel . . . . .	141
5.1.1.2	Conditions de calcul . . . . .	142
5.1.1.3	Indicateur de Tenue en Fatigue . . . . .	143
5.1.2	Comparaison de la tenue en fatigue des quatre microstructures génériques des alliages TiAl . . . . .	143
5.1.2.1	Tenue en fatigue à 20 °C . . . . .	143
5.1.2.2	Tenue en fatigue à 750 °C . . . . .	145
5.1.3	Analyse des zones d'amorçage . . . . .	146
5.1.3.1	Microstructure totalement-lamellaire . . . . .	147
5.1.3.2	Microstructure presque- $\gamma$ . . . . .	150
5.1.3.3	Microstructure presque-lamellaire . . . . .	151
5.1.3.4	Microstructure duplex . . . . .	153
5.1.4	Bilan & discussion . . . . .	154
5.2	Vers une prévision de la durée de vie en fatigue de l'alliage IRIS . . . . .	157
5.2.1	Alliage IRIS : microstructure et comportement mécanique . . . . .	157
5.2.2	Modélisation du comportement de l'alliage IRIS & pistes d'amélioration . . . . .	159
5.2.3	Vers la prévision de la durée de vie en fatigue par une analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue . . . . .	161

5.2.4 Vers l'utilisation de modèles de fatigue écrits à l'échelle de la microstructure 163

<b>Conclusions &amp; perspectives</b>	<b>165</b>
<b>A Géométrie des éprouvettes utilisées pour la réalisation des essais et étude du mouchetis pour la réalisation des essais <i>in situ</i> MEB</b>	<b>169</b>
A.1 Plans d'éprouvette . . . . .	169
A.2 Étude du mouchetis . . . . .	170
<b>B Génération des microstructures statistiquement représentatives avec Neper</b>	<b>173</b>
<b>C Complément de l'analyse des Indicateurs de Tenue en Fatigue</b>	<b>177</b>
<b>D Eprouvette pour l'analyse des phénomènes d'intrusion-extrusion</b>	<b>185</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>187</b>

# Introduction

## Contexte de l'étude

Un des défis des motoristes aéronautiques civils pour les décennies à venir est d'optimiser le rendement de leurs turbomachines afin de réduire les émissions de gaz à effet de serre liées au transport aérien. La hausse du rendement d'un turboréacteur peut passer par l'élévation de sa température de fonctionnement ou son allégement structurel. Les alliages intermétalliques TiAl, qui font l'objet d'un effort de recherche important depuis 30 ans, répondent à ces deux leviers [Clemens and Mayer, 2013].

Les alliages TiAl combinent d'excellentes propriétés mécaniques à haute température à une résistance spécifique élevée. Celle-ci est d'ailleurs supérieure à celle des superalliages à base nickel, matériaux couramment utilisés dans les parties chaudes des turboréacteurs [Appel and Wagner, 1998, Wu, 2006]. Les alliages TiAl présentent néanmoins l'inconvénient majeur d'être fragiles à température ambiante : leur ductilité et leur ténacité sont extrêmement faibles. Ces matériaux sont aujourd'hui utilisés dans les parties chaudes des turboréacteurs sous la forme d'aubes de turbine basse pression à des températures allant jusqu'à 700 °C, comme par exemple dans le GEnx présenté en Figure 1 ou le LEAP de CFM International [Bewlay et al., 2016, Bewlay et al., 2013].

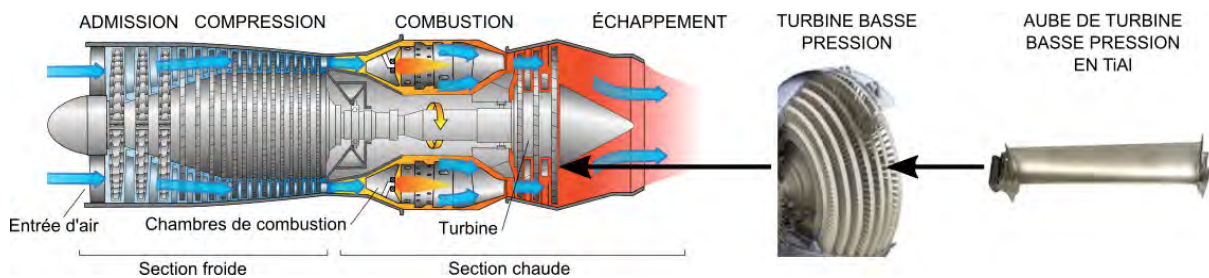


FIGURE 1 – Les alliages TiAl dans les turboréacteurs civils, exemple du GEnx [Wikipédia, 2020, Bewlay et al., 2016].

La génération d'alliages TiAl utilisée industriellement ayant atteint ses limites, la recherche se concentre aujourd'hui sur le développement de nouvelles nuances pouvant être produites plus facilement et fonctionner à des températures plus élevées, sous des chargements plus sévères [Kim and Kim, 2018]. Les propriétés en fatigue thermomécanique doivent donc être améliorées.

La fatigue désigne l'endommagement d'un matériau ou d'une pièce sous l'effet d'efforts répétés. Les phénomènes pilotant la durée de vie en fatigue à amorçage de fissures se produisent à l'échelle de la microstructure du matériau [Chan, 2010]. Cet amorçage est causé par des mécanismes liés à l'interaction entre les différents éléments en présence comme des grains, des précipités, des inclusions ou des dislocations [Sangid, 2013]. Dans le cas des alliages TiAl, comme pour les matériaux métalliques en général, la déformation plastique qui a lieu à l'échelle de la microstructure a un rôle prépondérant sur la durée de vie [Hénaff and Gloanec, 2005]. En effet, les

microstructures d'intérêt de ces matériaux contiennent majoritairement non pas des grains, mais des colonies lamellaires, dont le comportement mécanique est fortement anisotrope [Denquin and Naka, 1996].

Des micrographies issues d'observations en Microscopie Électronique à Balayage (MEB) et Microscopie Électronique à Transmission (MET) d'une microstructure lamellaire sont présentées en Figure 2. Les colonies contiennent un ensemble de lamelles submicrométriques. Cette structure lamellaire offre des propriétés mécaniques intéressantes, notamment en fluage, et c'est donc sa plasticité particulière qui semble piloter l'amorçage de fissures de fatigue [Kim and Dimiduk, 1991].

Différentes études micromécaniques montrent que les microstructures lamellaires se déforment plastiquement bien avant la limite d'élasticité macroscopique conventionnelle du fait de l'anisotropie plastique extrême des colonies [Botten et al., 2001, Edwards et al., 2019b, Löffl et al., 2019]. En parallèle, certains auteurs s'étant intéressés à la fatigue de ces microstructures suspectent ces zones d'activité plastique précoces d'être des sites d'amorçage de fissures de fatigue privilégiés [Jha et al., 2005, Patriarca et al., 2016].

Par ailleurs, les microstructures optimisées des alliages TiAl, c'est-à-dire celles offrant le meilleur compromis entre différentes propriétés mécaniques, sont devenues de plus en plus complexes avec les différentes générations d'alliage et contiennent des phases dont le rôle sur l'amorçage de fissures est encore inconnu [Edwards, 2018a].

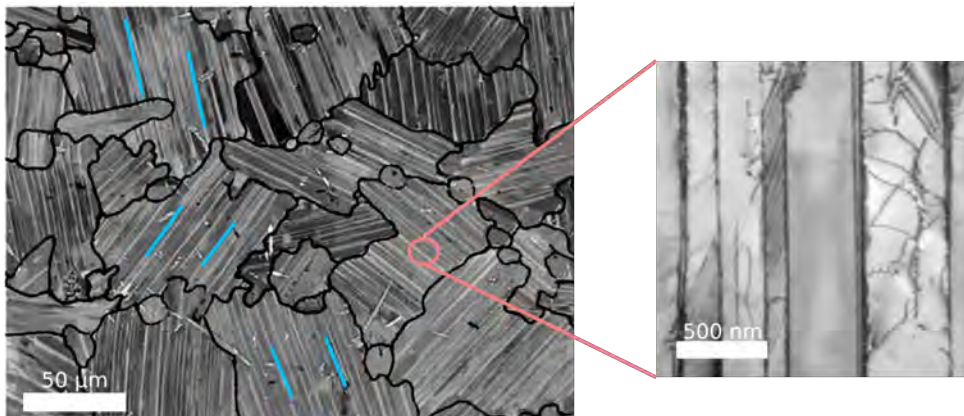


FIGURE 2 – À gauche, micrographie MEB d'une microstructure lamellaire issue de [Edwards et al., 2019b]. À droite, micrographie MET d'une structure lamellaire issue de [Voisin, 2014].

Afin d'établir un lien entre la microstructure d'un matériau et sa tenue en fatigue, des études numériques à l'échelle de la microstructure peuvent être réalisées [McDowell and Dunne, 2010]. Elles consistent à analyser les champs mécaniques dans la microstructure du matériau considéré afin de déterminer l'impact des caractéristiques microstructurales sur l'amorçage de fissure de fatigue.

L'application de ce type d'étude au cas des alliages TiAl est intéressante car elle permet d'inscrire une approche mécanicienne en parallèle et en interaction avec le développement de nouveaux alliages. En effet, la tenue en fatigue, fastidieuse et coûteuse à évaluer expérimentalement, est peu considérée lors de la phase de développement de matériau. L'approche numérique permet au contraire d'estimer rapidement et à partir d'un nombre d'essais limité les performances en fatigue d'un matériau ou d'une microstructure [Przybyla and McDowell, 2010, Przybyla and McDowell, 2011]. L'analyse des simulations permet alors d'effectuer un retour vers la métallurgie en proposant des pistes pour le design d'alliages aux propriétés améliorées en fatigue.

L'utilisation de ces méthodologies suppose néanmoins d'être capable de modéliser le comportement cyclique du matériau par calcul sur microstructure. Or, les alliages TiAl n'ont fait

l'objet que de peu de considération d'un point de vue simulation par rapport à d'autres familles de matériaux [Appel et al., 2016]. De plus, la présence de colonies lamellaires pose un problème multi-échelles dans la microstructure car il n'est pas envisageable de discrétiser explicitement les lamelles dans la modélisation, le coût de calcul serait trop important [Kabir et al., 2010].

Enfin, modéliser le comportement mécanique cyclique d'un matériau nécessite au préalable de le caractériser expérimentalement afin d'analyser les phénomènes en présence. Celui des alliages TiAl, relativement peu étudié, est caractérisé par la présence d'un effet Bauschinger très prononcé qui semble relié à la déformation hétérogène à l'échelle de la microstructure [Hoppe and Appel, 2014, Paul et al., 2016].

### Objectif & démarche

L'objectif de cette étude est de modéliser le comportement mécanique cyclique des alliages TiAl par calcul sur microstructure et homogénéisation numérique dans le but d'étudier leur tenue en fatigue. On cherche à répondre à des questions générales liées au rôle de la microstructure sur les propriétés en fatigue du matériau. Par exemple, quel est l'impact de l'anisotropie plastique des colonies lamellaires sur la tenue en fatigue ?

Pour cela, des travaux expérimentaux et numériques sont réalisés à différentes échelles d'intérêt :

- l'échelle macroscopique, celle de la réponse contrainte-déformation d'une éprouvette mécanique standard ;
- l'échelle mésoscopique, celle où la répartition de la déformation dans la microstructure d'intérêt peut être étudiée sur plusieurs grains ou colonies. Cette échelle n'est donc pas fixe mais dépend de la microstructure étudiée ;
- l'échelle microscopique, celle d'un ensemble de lamelles représentatif dans les colonies lamellaires ;

Dans le premier chapitre, un état de l'art permettant d'établir les bases de l'étude est proposé. Les alliages TiAl et leurs propriétés élémentaires sont d'abord présentés, avant de s'intéresser en détails à leurs propriétés en fatigue. Ensuite, les techniques permettant de modéliser le comportement mécanique des matériaux par calcul sur microstructure sont introduites, et l'état de leurs applications au cas des alliages TiAl explicité. Enfin, des études numériques qui ont permis d'établir un lien entre la microstructure d'un matériau et sa tenue en fatigue sont analysées. Les observations sont résumées pour justifier la démarche entreprise dans ce manuscrit.

Dans le second chapitre, le comportement mécanique des quatre microstructures dites génériques des alliages TiAl est étudié aux différentes échelles d'intérêt. L'objectif est notamment d'obtenir des résultats permettant de mettre en place la modélisation multi-échelles du comportement. À l'échelle macroscopique, le comportement sous sollicitation cyclique est caractérisé afin de quantifier l'impact des phases en présence sur la réponse contrainte-déformation. Ensuite, des essais micromécaniques permettant d'étudier la répartition de la déformation dans la microstructure sont réalisés.

Dans le troisième chapitre, le modèle de plasticité cristalline utilisé pour décrire le comportement mécanique des grains et des colonies lamellaires est présenté. Le comportement mécanique de monocolonies lamellaires, l'équivalent de monocristaux, est simulé afin de vérifier que le modèle permet de reproduire leur forte anisotropie plastique.

Dans le quatrième chapitre, les outils utilisés pour la génération de microstructures virtuelles dites statistiquement représentatives et la réalisation des calculs éléments finis sont présentés. Une méthodologie d'identification des paramètres matériaux du modèle de plasticité est proposée. Un des essais micromécaniques est modélisé pour s'assurer de la pertinence de la démarche et valider la représentativité des champs mécaniques numériques obtenus à l'échelle de la microstructure. Le comportement mécanique des quatre microstructures génériques est ensuite

modélisé, et l'aspect prédictif de l'approche multi-échelles retenue démontré.

Dans le cinquième et dernier chapitre, la modélisation multi-échelles du comportement mécanique est utilisée afin d'établir un lien entre la microstructure et la tenue en fatigue des alliages TiAl. Les performances des microstructures génériques sont comparées, et les caractéristiques microstructurales pilotant l'amorçage de fissure de fatigue identifiées pour chacune d'entre elles. Les résultats sont utilisés pour effectuer un retour vers la métallurgie en indiquant les zones à renforcer pour améliorer les propriétés en fatigue de futurs alliages. Enfin, des perspectives sont données pour proposer un modèle de fatigue basé sur une analyse d'indicateurs de tenue en fatigue voué à être utilisé dans le cadre du développement d'un alliage de nouvelle génération, l'alliage IRIS.

# Chapitre 1

## Étude bibliographique

### Résumé :

L'étude bibliographique est réalisée afin de poser les bases du travail et de le situer vis-à-vis de la littérature. Les alliages TiAl et leurs propriétés élémentaires sont d'abord présentés, en insistant sur le lien entre la microstructure et le comportement mécanique. Les propriétés en fatigue de ces matériaux sont ensuite étudiées. Par la suite, les techniques utilisées pour la modélisation du comportement mécanique par calcul sur microstructure sont introduites, et l'état de leurs applications au cas des alliages TiAl est détaillé. Enfin, les méthodes permettant l'analyse de la tenue en fatigue des matériaux par calcul sur microstructure sont étudiées.

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Les alliages TiAl : microstructures &amp; propriétés mécaniques . . . . .</b>	<b>15</b>
1.1.1	Diagramme de phase . . . . .	15
1.1.2	Phases cristallographiques et structure lamellaire . . . . .	16
1.1.3	Microstructures génériques & propriétés mécaniques élémentaires . . . . .	18
1.1.4	Déformation des phases constitutives des microstructures des alliages TiAl . . . . .	20
1.1.5	Lien microstructure-comportement mécanique des microstructures gé- nériques des alliages TiAl : analyse d'études micromécaniques . . . . .	25
<b>1.2</b>	<b>Fatigue des alliages TiAl . . . . .</b>	<b>29</b>
1.2.1	Comportement mécanique des alliages TiAl sous sollicitations cycliques . . . . .	29
1.2.1.1	Analyse macroscopique . . . . .	29
1.2.1.2	Mécanismes de déformation . . . . .	30
1.2.2	Identification des sites et mécanismes d'amorçage de microfissures de fatigue . . . . .	31
1.2.2.1	Sites d'amorçage . . . . .	32
1.2.2.2	Analyse des mécanismes d'amorçage . . . . .	33
1.2.3	Propagation de fissures de fatigue . . . . .	34
1.2.4	Analyse de campagnes de fatigue . . . . .	35
<b>1.3</b>	<b>Modélisation du comportement mécanique par calcul sur microstructure &amp; ap- plications aux alliages TiAl . . . . .</b>	<b>37</b>
1.3.1	Généralités du calcul sur microstructure . . . . .	37
1.3.1.1	Description d'une microstructure . . . . .	37
1.3.1.2	Comportement local : loi de plasticité cristalline . . . . .	38
1.3.1.3	Identification des paramètres . . . . .	39
1.3.1.4	Paramètres influençant les résultats : VER, conditions limites & maillage . . . . .	40
1.3.1.5	Approche analytique : modèles à champs moyens . . . . .	40
1.3.2	Applications aux alliages TiAl . . . . .	41



1.3.2.1	Microstructure presque- $\gamma$ . . . . .	41
1.3.2.2	Microstructures lamellaires . . . . .	42
1.3.2.3	Microstructures duplex . . . . .	43
1.3.2.4	Brève comparaison avec d'autres familles de matériaux . . . . .	43
<b>1.4</b>	<b>Approches multi-échelles pour l'étude de la tenue en fatigue . . . . .</b>	<b>43</b>
1.4.1	Généralités sur la modélisation de la fatigue . . . . .	44
1.4.1.1	Principe général . . . . .	44
1.4.1.2	Exemples de modèles macroscopiques . . . . .	44
1.4.2	Étude de la tenue en fatigue à l'échelle de la microstructure . . . . .	45
1.4.2.1	Analyse aux valeurs extrêmes d'indicateurs de tenue en fatigue	46
1.4.2.2	Exemples d'indicateurs de tenue en fatigue et des probléma- tiques associées . . . . .	47
1.4.2.3	Lien avec une durée de vie . . . . .	49
<b>1.5</b>	<b>Résumé des points clés &amp; et de la démarche adoptée . . . . .</b>	<b>50</b>

---

## 1.1 Les alliages TiAl : microstructures & propriétés mécaniques

### 1.1.1 Diagramme de phase

Les alliages TiAl, ou aluminures de titane, sont des composés intermétalliques constitués principalement de titane et d'aluminium. Le diagramme de phase binaire titane-aluminium couramment utilisé est celui établi par [McCullough et al., 1989], présenté en Figure 1.1. Ce diagramme sert aussi pour les alliages avec une faible proportion d'éléments d'addition bien que ceux-ci déplacent les frontières des domaines. Il comporte deux paliers péritectiques  $L + \beta \rightarrow \alpha$  et  $L + \alpha \rightarrow \gamma$ . En général, la teneur en aluminium se situe entre 45 % et 48 % pour obtenir de bonnes propriétés mécaniques à chaud.

Les alliages TiAl sont classés en trois générations [Thomas, 2011]. Les deux premières générations passent par le chemin de solidification *liquide*  $\rightarrow \alpha \rightarrow \alpha_2 + \gamma$ , ce qui entraîne une texture prononcée [Kim and Dimiduk, 1991]. Les alliages de première génération contiennent peu voire pas d'éléments d'addition. C'est au cours du développement de la deuxième que divers éléments ont été introduits pour améliorer les propriétés du matériau. C'est à cette deuxième génération qu'appartient l'alliage *GE* (souvent dénommé 48-2-2 du fait de sa composition Ti-(47-48)Al-2Cr-2Nb), développé par *General Electric* et aujourd'hui utilisé pour la fabrication d'aubes de turbine basse pression dans les moteurs LEAP et GENx [Huang, 1989, Bewlay et al., 2016]. La famille d'alliages XD développée par Rolls-Royce appartient aussi à cette génération [Larsen Jr, 1995].

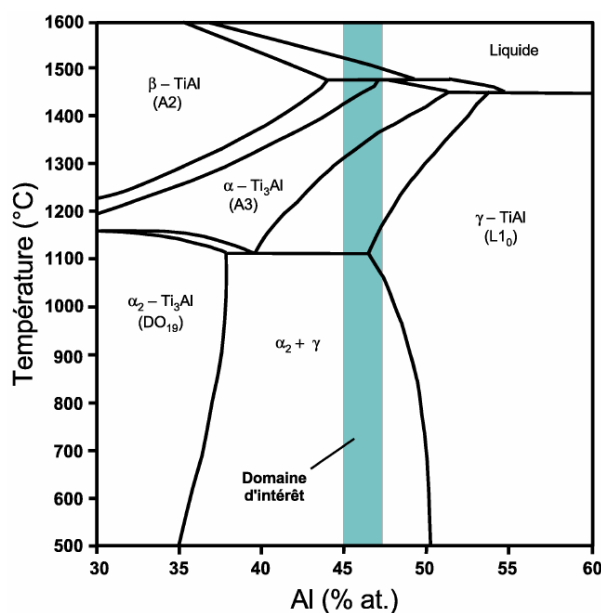


FIGURE 1.1 – Diagramme de phase binaire titane-aluminium (tiré de [Hériprié, 2006]).

Lors du développement de la troisième génération, les objectifs étaient d'obtenir une solidification plus isotrope, de faciliter la mise en forme du matériau et d'améliorer les propriétés à haute température [Appel et al., 2011]. À cet effet, des éléments lourds dits  $\beta$ -gènes ont été introduits afin d'étendre le domaine  $\beta$  pour modifier le chemin de solidification. C'est à cette génération d'alliages qu'appartiennent par exemple l'alliage G4 développé à l'Onera [Naka et al., 1998, Grange et al., 2004, Thomas and Naka, 2004], les alliages TNM et TNB [Smarsly et al., 2018, Clemens and Smarsly, 2011], ainsi que l'alliage IRIS [Couret et al., 2017].

L'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la température pour plusieurs alliages est présentée en Figure 1.2. On remarque des différences en termes de stratégie de design d'alliage.

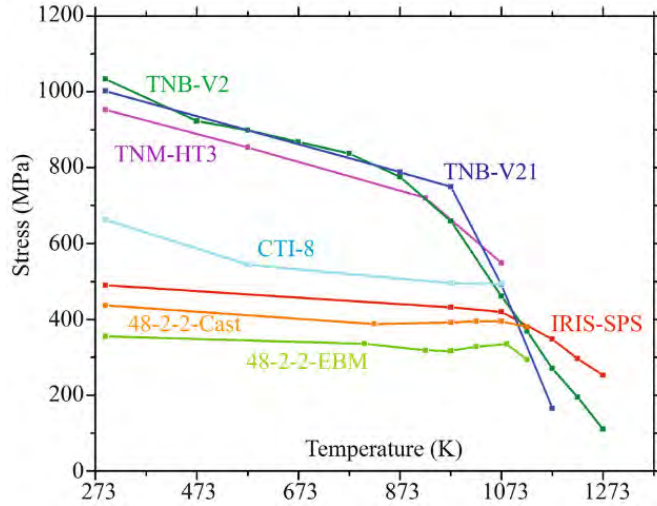


FIGURE 1.2 – Évolution de la limite d'élasticité en fonction de la température pour différentes générations d'alliage TiAl (reproduit de [Couret et al., 2017]).

Les alliages TNB et TNM présentent une limite d'élasticité très élevée jusqu'à 700 °C, suivi d'une diminution importante au-delà. Dans un autre registre, l'alliage IRIS présente une résistance certes plus faible, mais quasi-constante jusqu'à 700 °C, et qui diminue peu ensuite. Enfin, on note une nette augmentation de la limite d'élasticité des nouvelles générations d'alliages par rapport à l'alliage de référence *GE* 48-2-2.

### 1.1.2 Phases cristallographiques et structure lamellaire

Dans la plupart des alliages et microstructures, trois structures cristallographiques sont principalement observées (présentées en Figure 1.3) :

- la phase  $\gamma$ -TiAl de structure quadratique  $L1_0$  de rapport  $c/a \approx 1,02$ . Du fait de ce faible ratio, elle est traitée la plupart du temps comme une structure cubique à faces centrées. Les directions et les plans de glissement sont alors notés  $\langle uvw \rangle$  et  $\{ijk\}$  ce qui signifie que seuls les deux premiers indices sont permutable [Hug et al., 1988] ;
- la phase  $\alpha_2$ -Ti<sub>3</sub>Al hexagonale ordonnée de structure  $DO_{19}$  ;
- la phase  $\beta_0$ -TiAl cubique centrée.

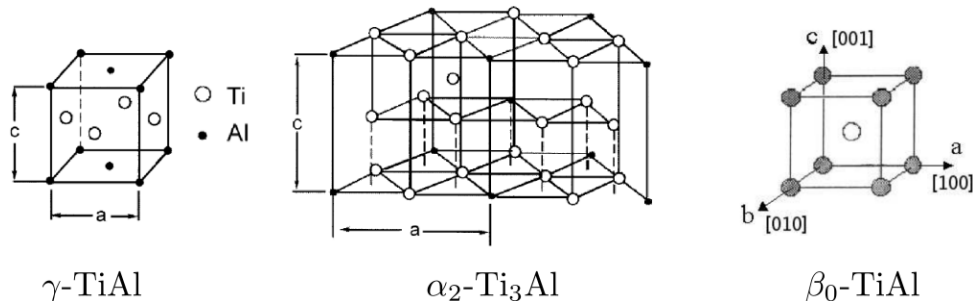


FIGURE 1.3 – Structures cristallographiques rencontrées dans les microstructures des alliages TiAl.

Lorsque la température de traitement ou de fabrication est assez élevée et le refroidissement du matériau suffisamment rapide, des colonies lamellaires, parfois appelées grains lamellaires par

analogie, sont observées dans les microstructures. Ces colonies sont constituées d'une alternance irrégulière de lamelles de phase  $\gamma$  et de lamelles de phase  $\alpha_2$ . Le modèle de précipitation de ces lamelles est connu [Denquin and Naka, 1996]. Les lamelles  $\gamma$  précipitent parallèlement au plan de base (0001) de la phase  $\alpha_2$ , ce qui correspond à une transformation eutectoïde de type  $\alpha \rightarrow \alpha_2 + \gamma$ . Cette précipitation suit la relation  $\{111\} // (0001)_{\alpha_2}$  et  $\langle 110 \rangle_{\gamma} // \langle 1120 \rangle_{\alpha_2}$  [Blackburn et al., 1970]. Dans une même colonie, les lamelles de phase  $\alpha_2$  ont toutes la même orientation (celle de la phase  $\alpha$  initiale) et tous les joints de lamelles sont parallèles au plan basal (0001).

Il existe alors six orientations possibles pour les lamelles  $\gamma$  que l'on classe en deux groupes : les variants parallèles en M pour "Matrix", et les variants anti-parallèles T pour "Twin", tous les variants étant présents dans des quantités équivalentes [Zghal et al., 1997]. Théoriquement quatre types d'interfaces  $\gamma$ - $\gamma$  sont possibles, mais une n'est jamais observée car trop instable [Denquin and Naka, 1993]. Ces interfaces ont été activement étudiées, notamment pour caractériser leur rôle sur la déformation [Zghal and Couret, 2001, Zghal et al., 2001].

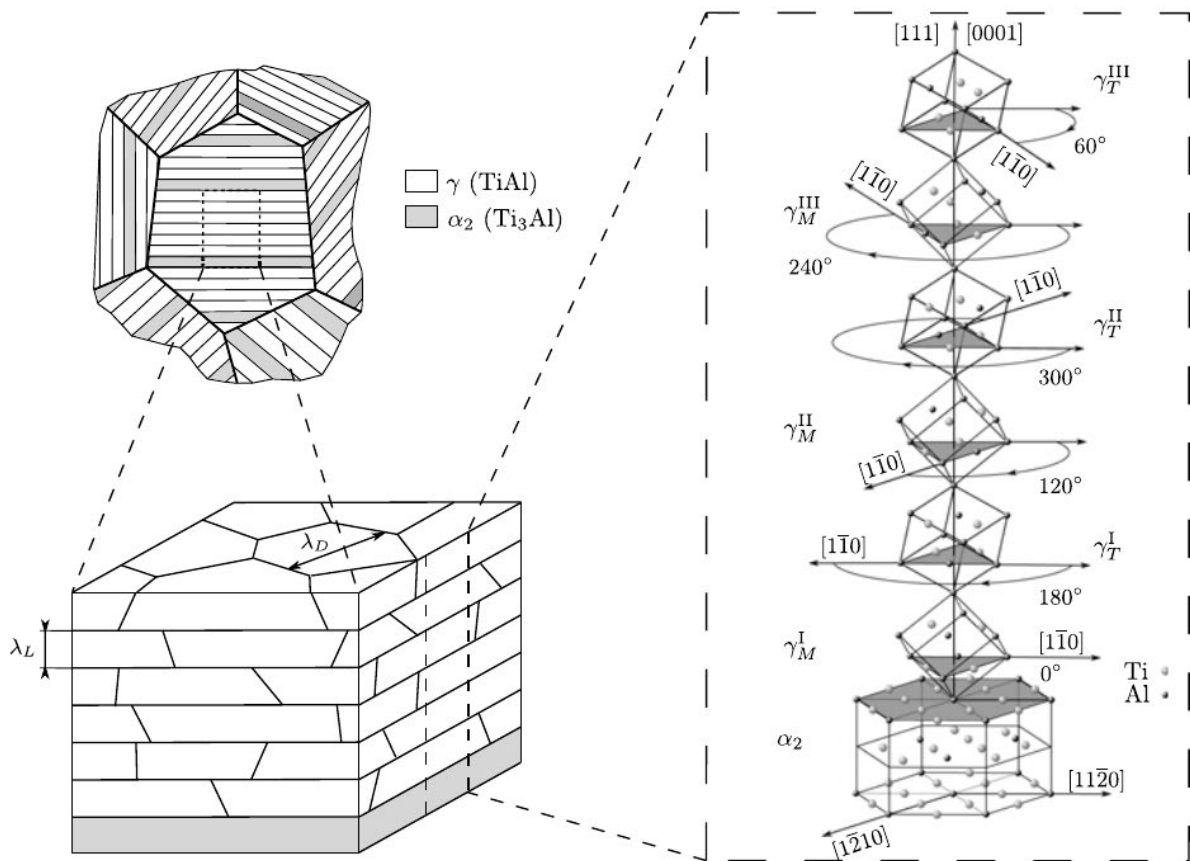


FIGURE 1.4 – Schéma de la structure lamellaire tiré de [Butzke and Bargmann, 2015] permettant de visualiser les relations d'orientation. Le polycristal est formé de colonies lamellaires. On distingue sur ce schéma les trois longueurs caractéristiques : la taille des colonies, l'épaisseur des lamelles  $\lambda_l$  et la taille des domaines  $\lambda_D$ .

Un schéma représentant la structure lamellaire est présenté en Figure 1.4. Les lamelles ne sont pas homogènes, mais constituées de domaines correspondant aux différents variants  $\gamma$ . Les six orientations possibles des variants s'obtiennent en réalisant des rotations de  $60^\circ$  autour du plan (111), ou par équivalence en réalisant des rotations de  $60^\circ$  autour du plan basal (0001) de la phase  $\alpha_2$  grâce aux relations d'orientation. La taille des lamelles, le nombre d'interfaces  $\gamma$ - $\gamma$  et  $\gamma$ - $\alpha_2$ , ainsi que l'espacement entre deux lamelles  $\alpha_2$  peuvent être contrôlés en jouant sur la

vitesse de refroidissement du matériau [Beschliesser et al., 2002]. Nous verrons par la suite que ces paramètres microstructuraux ont un impact sur les propriétés mécaniques. Trois longueurs caractéristiques importantes sont à retenir : la taille des colonies (équivalent de la taille des grains), l'épaisseur des lamelles  $\lambda_L$  et la taille des domaines  $\lambda_D$ .

### 1.1.3 Microstructures génériques & propriétés mécaniques élémentaires

Les microstructures des alliages TiAl sont constituées des différentes phases cristallographiques présentées ci-dessus sous la forme de grains globulaires et de colonies lamellaires. La microstructure d'un matériau dépend de sa composition chimique, du procédé de fabrication utilisé ainsi que des traitements thermiques appliqués. Elle peut donc être optimisée pour une application donnée (voir par exemple [Schwaighofer et al., 2014]). Dans le cas des alliages TiAl, les microstructures sont classées en quatre catégories suivant la classification proposée par [Kim and Dimiduk, 1991]. Elles sont dénommées microstructures génériques dans la suite de ce document. Un schéma issu de [Clemens and Mayer, 2013] permettant de les visualiser est proposé en Figure 1.5.

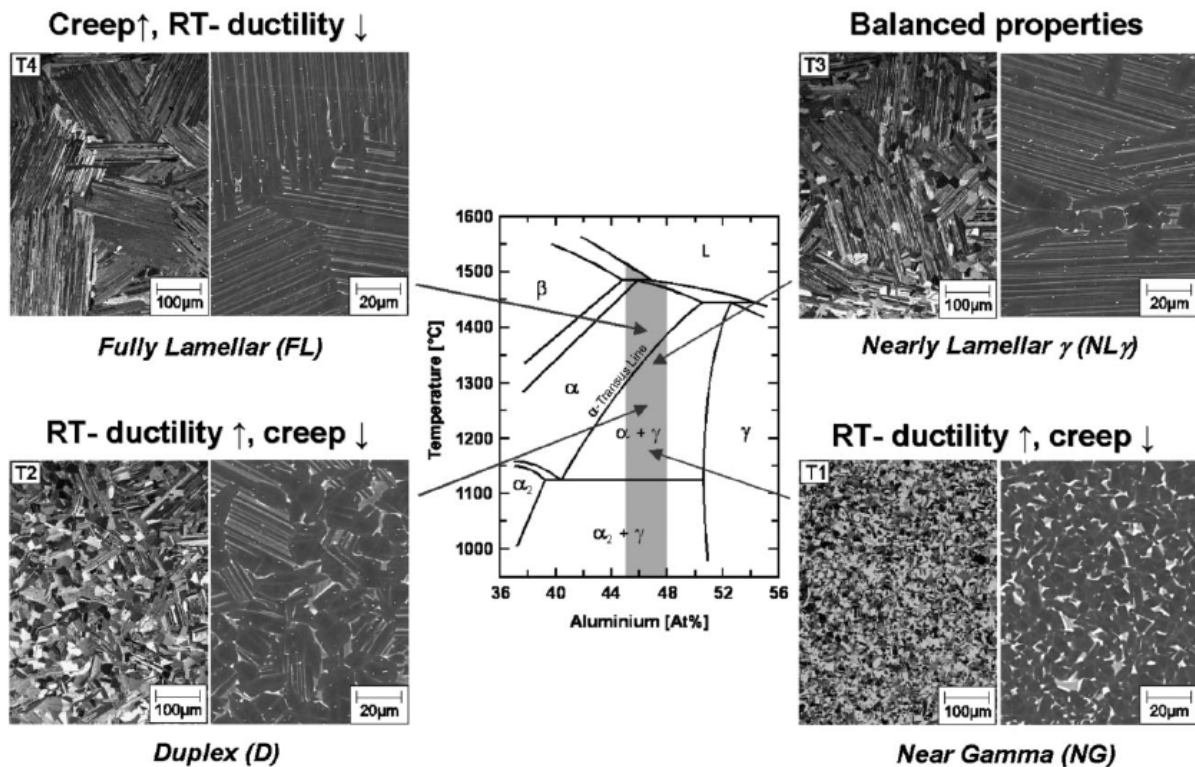


FIGURE 1.5 – Diagramme de phase et microstructures génériques : exemple de l'alliage TNM [Clemens and Mayer, 2013, McCullough et al., 1989]. Pour chaque microstructure, l'image de gauche est obtenue en microscopie optique, et l'image de droite en Microscopie Electronique à Balayage (MEB). Les grains  $\gamma$  sont sombres, les nodules  $\alpha_2$  sont grisâtres. Les colonies lamellaires contiennent une alternance des deux contrastes.

#### Microstructure presque- $\gamma$

Cette microstructure s'obtient avec un maintien isotherme au-dessus du palier eutectoïde, c'est-à-dire dans le bas du domaine ( $\alpha + \gamma$ ) (Figure 1.5). Elle est constituée de grains monophasés  $\gamma$ , de nodules  $\alpha_2$ , et dans le cas des alliages de troisième génération de nodules  $\beta_0$ .

### Microstructure lamellaire ou totalement-lamellaire

Cette microstructure s'obtient par un traitement sur-transus avec un maintien isotherme dans le domaine  $\alpha$ , suivi d'un refroidissement plutôt lent (vitesse comprise entre 4 °C et 600 °C [Beschiesser et al., 2002]). Elle est entièrement composée de colonies lamellaires ( $\alpha_2 + \gamma$ ) avec des diamètres équivalents en général supérieurs à 100  $\mu\text{m}$ . En Figure 1.5, les colonies peuvent être distinguées grâce à l'orientation apparente du plan d'interface lamellaire.

### Microstructure presque-lamellaire

Cette microstructure s'obtient par un traitement légèrement sub-transus avec un maintien isotherme à la frontière entre les domaines  $\alpha$  et ( $\alpha + \gamma$ ). Ce traitement est compliqué à réaliser car la fenêtre de température adéquate est limitée, d'autant plus que les frontières des domaines du diagramme de phase sont modifiées lors de l'ajout d'éléments d'addition [Wu et al., 2004]. Elle est majoritairement composée de colonies lamellaires ( $\alpha_2 + \gamma$ ), mais contient aussi une part significative de petits grains  $\gamma$  globulaires (environ 10 %).

### Microstructure duplex

Cette microstructure s'obtient par un traitement sub-transus avec un maintien isotherme au milieu du domaine ( $\alpha + \gamma$ ). Elle est composée de colonies lamellaires ( $\alpha_2 + \gamma$ ) et de grains  $\gamma$  globulaires dans des proportions et des tailles à peu près équivalentes.

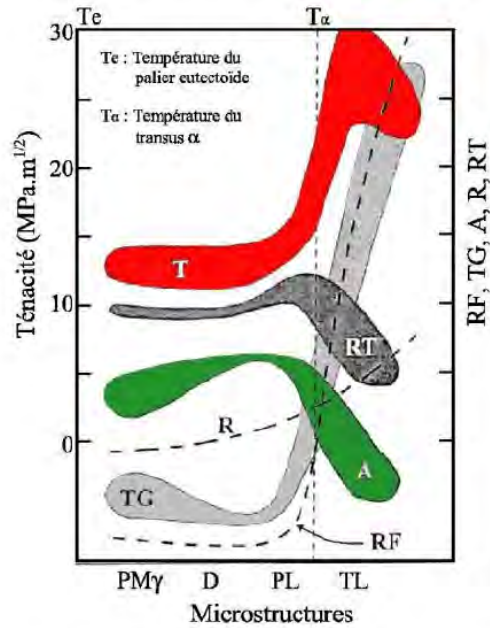
### Influence de la microstructure sur les propriétés mécaniques élémentaires

L'influence de la microstructure sur les propriétés mécaniques élémentaires est connue [Kim, 1995]. Le diagramme proposé par [Kim and Dimiduk, 1991] présenté en Figure 1.6 résume les différentes découvertes.

Premièrement, l'allongement à rupture ( $A$  enveloppe verte) des microstructures totalement-lamellaires est plus faible que celui des autres microstructures génériques. La ténacité ( $T$  enveloppe rouge) suit la relation inverse : la présence de colonies lamellaires l'améliore. La résistance au fluage ( $RF$  trait pointillé) suit la même évolution que la ténacité : les microstructures totalement-lamellaires sont bien meilleures, l'ajout de colonies lamellaires est bénéfique. Ce graphique montre que les microstructures presque-lamellaires présentent le meilleur compromis entre les différentes propriétés mécaniques élémentaires.

La relation entre la taille des grains et la limite d'élasticité a été étudiée afin de vérifier si les alliages TiAl suivent une loi type Hall-Petch. Dans le cas des microstructures presque- $\gamma$ , la limite d'élasticité macroscopique et la taille des grains sont bien reliées par une telle loi [Jung et al., 1996]. Dans le cas des microstructures majoritairement lamellaires, la limite d'élasticité dépend d'abord de la taille des colonies, puis de l'épaisseur des lamelles (ou l'espacement lamellaire) et dans une moindre mesure de la taille des domaines [Tang et al., 2002, Liu and Maziasz, 1998, Berteaux, 2005, Kim and Dimiduk, 1991, Umakoshi and Nakano, 1992, Caillard and Couret, 2009]. Cela rejoint des travaux portant sur le lien entre la taille de grain et la résistance mécanique des métaux, qui montrent que l'effet Hall-Petch n'est pas uniquement décrit par une loi reliant la limite d'élasticité à la racine carré de la taille des grains [Dunstan and Bushby, 2014].

Les microstructures majoritairement lamellaires sont celles d'intérêt pour les alliages TiAl du fait de leur excellente résistance au fluage. Néanmoins, leur faible allongement à rupture a longtemps freiné une application industrielle. Ces microstructures ont en effet une forte propension à fissurer [Chan and Kim, 1992, Zheng et al., 2004]. Cet amorçage de microfissures est relié à la plasticité locale et aux mécanismes de déformation des alliages TiAl.



RF: Résistance au Fluage - TG: Taille de Grains - A: Allongement - R: Résilience - RT: Résistance à la Traction - T: Ténacité - PM $\gamma$ : quasi monophasée  $\gamma$  - D: Duplex - PL: Presque Lamellaire - TL: Totalement Lamellaire.

FIGURE 1.6 – Diagramme représentant l'évolution des propriétés mécaniques élémentaires des alliages TiAl en fonction du type de microstructure issu de [Kim, 1995]. La taille de l'enveloppe donne un aperçu de la dispersion expérimentale observée.

#### 1.1.4 Déformation des phases constitutives des microstructures des alliages TiAl

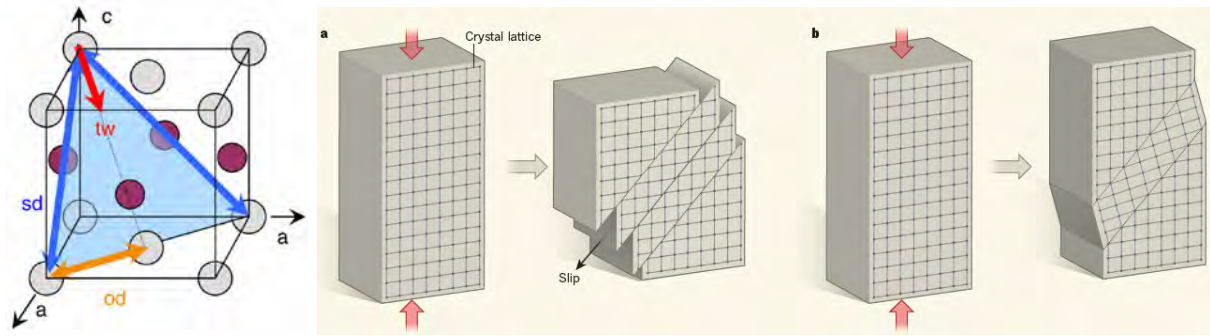
##### Phase $\gamma$

Trois mécanismes de déformation sont recensés pour la phase  $\gamma$  :

- Les dislocations ordinaires, qualifiées comme telles pour leur ressemblance avec les dislocations d'un cristal cubique à face centrée : leur vecteur de Burgers (flèche jaune sur la Figure 1.7a) est parallèle à une direction  $\langle 110 \rangle$  ;
- Les superdislocations : leur vecteur de Burgers (flèches bleues en Figure 1.7a) est parallèle à une direction  $\langle 101 \rangle$ . En raison de l'ordre à longue distance, il est nécessaire de placer les atomes sur une longueur deux fois plus longue que pour les dislocations ordinaires pour restaurer le cristal parfait ;
- Le maillage  $(111)\langle 112 \rangle$ , reconnaissable au fait qu'il entraîne une rotation du réseau cristallin (flèche rouge en Figure 1.7a). Il est considéré comme un mécanisme unidirectionnel : inverser le sens de chargement ne crée pas une nouvelle dislocation de macle dans le sens inverse. Dans un grain sous une sollicitation donnée, lorsqu'un vecteur de Burgers de dislocation de Shockley est actif pour un système de maillage, le vecteur de sens opposé ne l'est pas en raison d'une incompatibilité avec la séquence d'empilement des plans denses.

Un schéma issu de [Bourne, 2017] est proposé en Figure 1.7b afin de comprendre la différence entre une déformation causée par des dislocations et par maillage. Des observations en Microscopie Electronique à Transmission des différents modes de déformation sont aussi proposées en Figure 1.8.

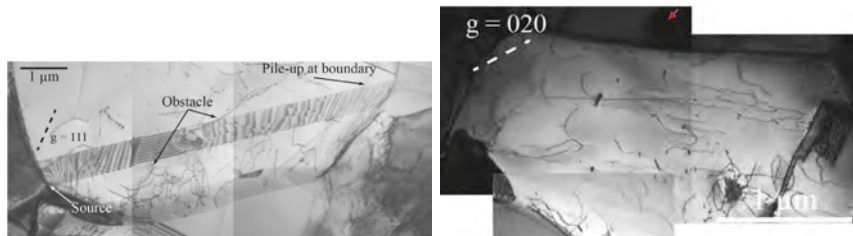
La déformation de la phase  $\gamma$  est difficile, comme souvent dans les composés intermétalliques. Les superdislocations sont recensées comme un mécanisme de déformation car elles ont été observées en abondance lors d'études réalisées sur des monocristaux riches en aluminium (Ti-56



(a) Schéma des mécanismes de déformation de la phase  $\gamma$  issu de [Bieler et al., 2009].

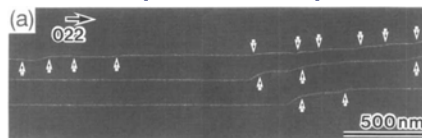
(b) Schéma issu de [Bourne, 2017] présentant la différence entre une déformation par dislocation (gauche) et par maillage (droite).

FIGURE 1.7 – Déformation de la phase  $\gamma$ -TiAl. "tw", "sd" et "od" désignent respectivement le maillage, les superdislocations et les dislocations ordinaires.



(a) Observation d'une macle traversant un grain  $\gamma$  issue de [Monchoux et al., 2017].

(b) Observation de dislocations ordinaires dans un grain  $\gamma$  issue de [Monchoux et al., 2017].



(c) Observation de superdislocations dans un monocristal  $\gamma$  issue de [Inui et al., 1997].

FIGURE 1.8 – Images en Microscopie Electronique à Transmission (MET) des différents mécanismes de déformation de la phase  $\gamma$ -TiAl.

at.% Al) [Inui et al., 1997, Jiao et al., 1998]. Dans ces études, le maillage ne contribue quasiment pas à la déformation. Or, dans les travaux portant sur les alliages d'intérêt qui ont une teneur en aluminium (Ti-(42-48) at.% Al), les superdislocations ne sont quasiment pas observées, alors que des macles sont observées en abondance [Appel and Wagner, 1998, Monchoux et al., 2017]. Ainsi, il est admis dans la littérature que les superdislocations ne doivent quasiment pas être considérées pour discuter de la déformation des alliages TiAl [Appel et al., 2016].

La problématique est alors la suivante : en considérant uniquement le maillage (mécanisme unidirectionnel) et les dislocations ordinaires, le critère de compatibilité de von Mises n'est pas respecté car il n'y a pas cinq systèmes de glissement indépendants [Mises, 1928, Groves and Kelly, 1963, Goo, 1998]. Cela explique en partie la faible ductilité observée sur ces matériaux sur une large gamme de température.

Néanmoins, à partir d'une certaine température qui varie selon l'alliage étudié mais est souvent située autour de 700 °C, la déformation est grandement facilitée par l'activation du



glissement dévié et de la montée des dislocations ordinaires [Appel et al., 2011]. La déformation par dislocation ordinaire et maclage est alors abondante.

### Phase $\alpha_2$

La phase  $\alpha_2$ -Ti<sub>3</sub>Al se déforme très peu et est considérée comme encore moins déformable que la phase  $\gamma$ -TiAl. La déformation a lieu principalement sur les plans prismatiques  $\{10\bar{1}0\}$  (indiqués en rouge sur la Figure 1.9), dans une moindre mesure sur les plans basaux (0001) (indiqués en vert Figure 1.9) et encore moins sur les plans pyramidaux (indiqués en gris Figure 1.9).

En théorie cinq systèmes de glissement ont été identifiés, mais seuls trois d'entre eux sont réellement actifs [Appel et al., 2011, Inui et al., 1993] :

- sur les plans prismatiques  $\{10\bar{1}0\}$  avec  $\vec{b} = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$  ;
- sur les plans de base (0001) avec  $\vec{b} = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$  ;
- sur les plans pyramidaux de deuxième espèce  $\{11\bar{2}0\}$  avec  $c + \frac{a}{2} = \frac{1}{3}\langle 1\bar{2}16 \rangle$

À haute température, le glissement sur le plan prismatique reste le plus favorable. Une évolution anormale du glissement sur les plans pyramidaux est observée, car celui-ci devient plus difficile lorsque la température augmente [Minonishi, 1995].

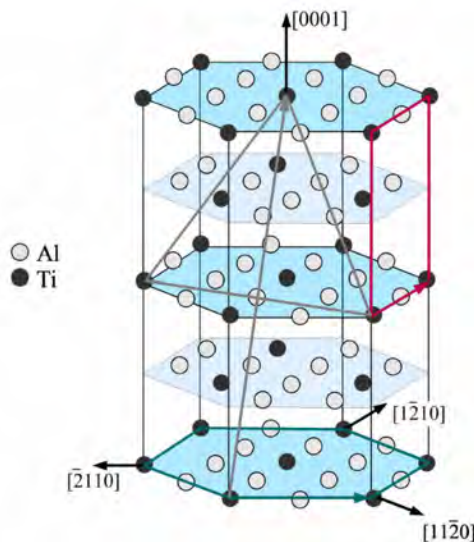


FIGURE 1.9 – Schéma des plans de glissement de la phase  $\alpha_2$ -Ti<sub>3</sub>Al issu de [Hériprié, 2006]. En rouge est indiqué le plan prismatique, en vert le plan basal et en gris le plan pyramidal.

### Phase $\beta_0$

Cette phase de structure cubique centrée se déforme très peu dans la gamme de température d'utilisation (20 °C à 800 °C), mais facilite la mise en forme du matériau à très haute température [Clemens and Mayer, 2013]. Elle est régulièrement observée vierge de toute déformation plastique ou très peu déformée [Hoppe and Appel, 2014, Erdely et al., 2018]. D'une façon générale, son rôle dans la déformation du matériau est peu connu alors qu'elle est de plus en plus présente dans les alliages contenant des éléments lourds [Appel et al., 2011]. Des mécanismes de déformation ont été reportés mais pour des compositions chimiques très éloignées de celles d'intérêt pour les alliages TiAl. Il ne nous semble donc pas utile de les préciser.

### Structure lamellaire ( $\alpha_2 + \gamma$ )

La structure lamellaire est constituée d'une alternance de lamelles de phase  $\gamma$  et de phase  $\alpha_2$ . Individuellement, ces phases ont une déformation fortement anisotrope et ne satisfont pas le critère de von Mises. Néanmoins, ce critère est respecté dans le cas de la structure lamellaire

grâce aux relations d'orientations entre les lamelles si l'on considère la déformation des lamelles  $\gamma$  et  $\alpha_2$  simultanément [Goo, 1998].

L'association de la morphologie anisotrope de la structure lamellaire et de la déformation plastique des phases constituantes entraîne une déformation globale encore plus anisotrope. Pour la révéler, des essais de compression ont été réalisés sur des monocolonies lamellaires qu'on retrouve sous le nom de "Polysynthetically twinned (PST) crystal" dans la littérature, soit l'équivalent de monocristaux. Les éprouvettes testées ne contiennent qu'une colonie lamellaire, dont l'orientation du plan d'interface lamellaire (plan basal de la phase  $\alpha_2$ ) vis-à-vis de l'axe de chargement est connue comme présenté en Figure 1.10 [Inui et al., 1992].

Les courbes contrainte-déformation issues d'essais de traction à température ambiante sont présentées en Figure 1.10. Une anisotropie significative est observée, avec une contrainte élevée lorsque les lamelles sont parallèles ou perpendiculaires à l'axe de chargement, et une contrainte faible lorsqu'elles sont en diagonale. L'allongement à rupture est très variable suivant l'orientation du plan d'interface.

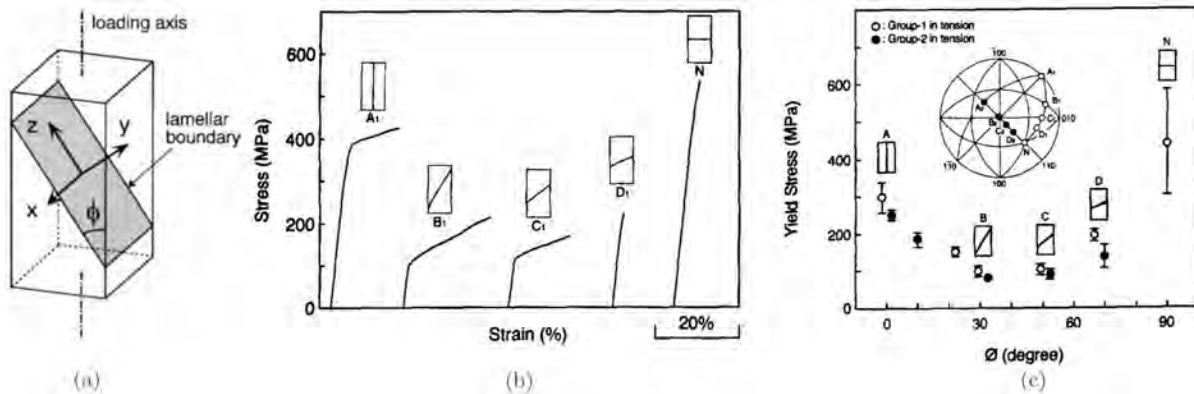


FIGURE 1.10 – Caractéristique de la déformation dans la structure lamellaire [Inui et al., 1992, Kishida et al., 1999]. (a) Principe des essais réalisés : une éprouvette contient une seule colonie lamellaire, dont l'orientation de l'interface vis-à-vis de l'axe de chargement est contrôlée. (b) Résultats d'essais de traction à température ambiante. Les valeurs de déformations indiquées sont très probablement surestimées du fait du montage expérimental utilisé. (c) Évolution de la limite d'élasticité en fonction de l'angle entre l'axe de chargement et le plan d'interface lamellaire.

Pour compléter, l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de l'angle entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement est présentée en Figure 1.10. On observe une forme en U caractéristique de la structure lamellaires des TiAl : les colonies favorablement orientées (en diagonale) se déforment plastiquement pour des contraintes 5 fois plus faibles que les colonies les plus dures (perpendiculaires).

Cette anisotropie plastique s'explique par une activation particulière des mécanismes de déformation dans la structure lamellaire due aux relations d'orientations entre lamelles. Un schéma expliquant ces mécanismes adapté de [Werwer and Cornec, 2006] est présenté en Figure 1.11. Les facteurs de Schmidt référencés ci-dessous ont été calculés par [Kishida et al., 1998]. On rappelle qu'il existe deux longueurs caractéristiques dans une colonie lamellaire : l'épaisseur des lamelles  $\lambda_L$  et la taille des domaines  $\lambda_D$  avec  $\lambda_L \ll \lambda_D$  (voir sous-section 1.1.2). Trois modes de déformation correspondants à une classification des systèmes de glissement proposée par [Lebensohn et al., 1998] sont définis :

- **Mode mou ou longitudinal** (Figure 1.11.(a)) : lorsque l'angle entre l'axe de chargement et le plan d'interface lamellaire est d'environ  $45^\circ$ , les systèmes de glissements les plus

favorables se situent dans le plan d'interface lamellaire avec un facteur de Schmidt élevé ( $> 0,4$ ). Les libres parcours des macles et des dislocations sont importants et seulement obstrués par les interfaces entre domaines.

- **Mode dur ou transverse** (Figure 1.11.(b)) : lorsque les lamelles sont perpendiculaires à l'axe de chargement, les systèmes de glissements les plus favorables n'ont pas un facteur de Schmidt élevé (0,3 maximum), et sont ceux dont le plan et le sens de glissement sont transverses au plan d'interface lamellaire.
- **Mode mixte** (Figure 1.11.(c)) : lorsque les lamelles sont parallèles à l'axe de chargement, les systèmes de glissements les plus favorables ont un facteur de Schmidt élevé (0,4 maximum). Le sens de glissement se situe dans les lamelles, mais le plan de glissement est transverse aux interfaces.

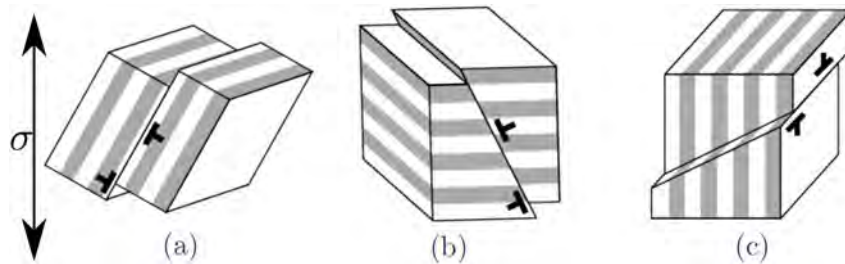


FIGURE 1.11 – Schéma expliquant la déformation dans la structure lamellaire adapté de [Werwer and Cornec, 2006]. (a) Mode mou : lamelles en diagonales = plan de déformation et sens de glissement dans le plan d'interface lamellaire, (b) Mode dur : lamelles perpendiculaires = plan de déformation et sens de glissement transverses au plan d'interface, (c) Mode mixte : lamelles parallèles = sens de glissement dans le plan des lamelles, mais plan de déformation transverse.

Les cristaux PST étaient fabriqués dans des conditions très différentes de celles des alliages industriels. Il n'est donc pas trivial que les résultats obtenus soient aussi valables pour discuter de la déformation de polycristaux (analogie de polycolonies). Récemment, plusieurs équipes ont étudié la déformation de colonies lamellaires sous la forme de micropiliers pour répondre à cette interrogation [Porter et al., 2009, Edwards et al., 2016, Palomares-García et al., 2017, Edwards et al., 2019c].

Le principe est le suivant : dans la chambre d'un microscope, des piliers sont découpés par Focus Ion Beam (FIB) dans une seule colonie lamellaire du matériau. Un nanoindentateur situé dans la chambre du microscope permet ensuite de comprimer le pilier. En découpant des micropiliers dans des colonies lamellaires repérées au préalable, il est alors possible de contrôler l'orientation entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement. Un schéma issu de [Edwards et al., 2016] montrant la géométrie d'un micropilier lamellaire est présenté en Figure 1.12.(a).

Le même type d'essais que sur les cristaux PST peut alors être réalisé afin de caractériser l'anisotropie plastique directement sur des colonies lamellaires issues de microstructures d'alliages d'intérêt. Si les courbes force-déplacement obtenues avec ce type d'essai sont compliquées à interpréter à cause des phénomènes de flambement, il a par contre été démontré qu'il n'y a pas d'effet d'échelle sur la limite d'élasticité obtenue [Daum et al., 2013].

L'évolution de la limite d'élasticité en fonction de l'angle entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement pour des micropiliers lamellaires obtenue par [Palomares-García et al., 2017] est présentée en Figure 1.12.(b). La même forme en U que dans le cas des monocristaux est observée : l'anisotropie plastique est conservée que l'on soit sur monocristaux ou dans un polycristal. Les niveaux de contraintes sont par contre différents selon les études, ce qui s'explique par des différences de paramètres microstructuraux (taille des lamelles, taille des domaines) et

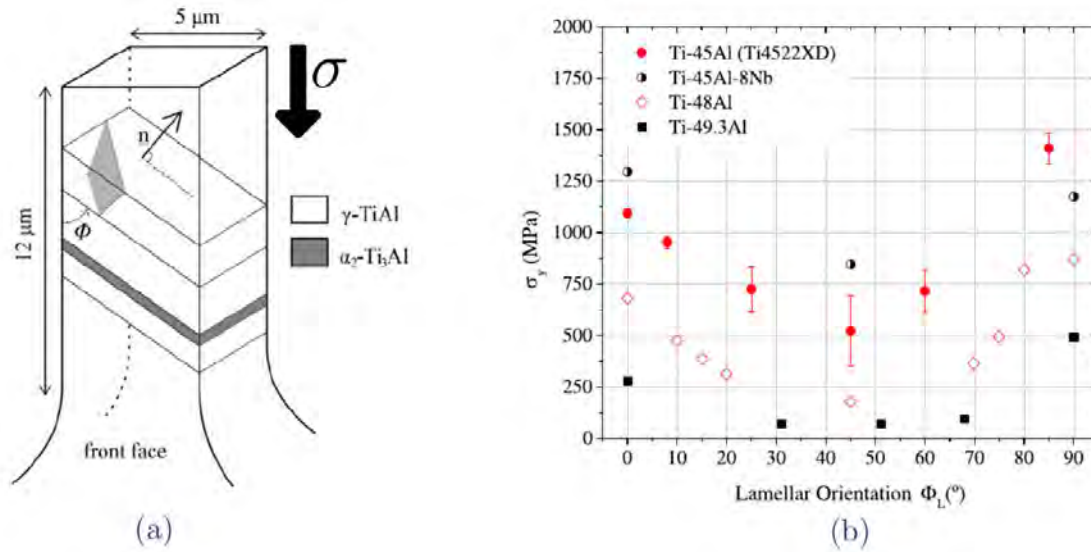


FIGURE 1.12 – Étude de micropiliers lamellaires. (a) Schéma issu de [Edwards et al., 2016] présentant la géométrie des micropiliers découpés par FIB directement dans une colonie lamellaire d’un polycristal. (b) Évolution de la limite d’élasticité en fonction de l’angle interface lamellaire/axe de chargement issue de [Palomares-García et al., 2017]. Les points rouges (Ti4522XD) correspondent aux résultats obtenus sur micropiliers, les autres données proviennent de travaux réalisés sur cristaux PST.

la présence d’éléments d’addition [Yao et al., 1995, Umeda et al., 1997].

En conclusion, la déformation des colonies lamellaires, même à l’intérieur des microstructures, peut être discutée en utilisant la classification par mode de déformation.

### 1.1.5 Lien microstructure-comportement mécanique des microstructures génériques des alliages TiAl : analyse d’études micromécaniques

L’objectif de cette sous-section est d’étudier les travaux qui ont permis d’établir un lien entre les mécanismes de déformation détaillés ci-dessus et le comportement mécanique des quatre microstructures génériques des alliages TiAl. Un intérêt particulier est porté sur les expériences permettant l’analyse de la déformation à l’échelle de la microstructure.

#### Microstructure presque- $\gamma$

Le comportement en traction ou compression de ces microstructures est caractérisé par la présence d’une bosse à l’entrée du domaine plastique comme indiqué sur le schéma en Figure 1.13.a. Un domaine élastique (A-B) est d’abord observé, suivi d’une bosse (B-C), d’un plateau (C-D), puis d’une consolidation (D-E).

Pour étudier son origine, [Kauffmann et al., 2000a] ont réalisé un essai de compression couplé à des mesures d’émission acoustique. Ce type de mesure non destructive permet d’associer des pics d’émission acoustique à l’activation de la déformation plastique ou la fissuration [Wisner et al., 2015]. Sur la Figure 1.13.c, la courbe contrainte-déformation et l’évolution du pic d’émission acoustique en fonction de la déformation sont présentées. Le pic d’émission acoustique et la bosse apparaissent simultanément. D’après les auteurs, ce phénomène est lié à l’activation du maillage.

Pour étudier la déformation à l’échelle de la microstructure, [Gélébart, 2002, Héripré, 2006] ont réalisé des essais de compression *in situ* MEB avec suivi de la déformation en surface de

l'échantillon par corrélation d'images, couplé à la détection d'émission acoustique. À l'entrée du domaine plastique, un pic d'émission acoustique a aussi été observé. La carte des déformations équivalentes à la fin de l'essai (plus de 5 % de compression) est présentée en Figure 1.13.b. Une localisation de la déformation avec la formation de bandes est observée.

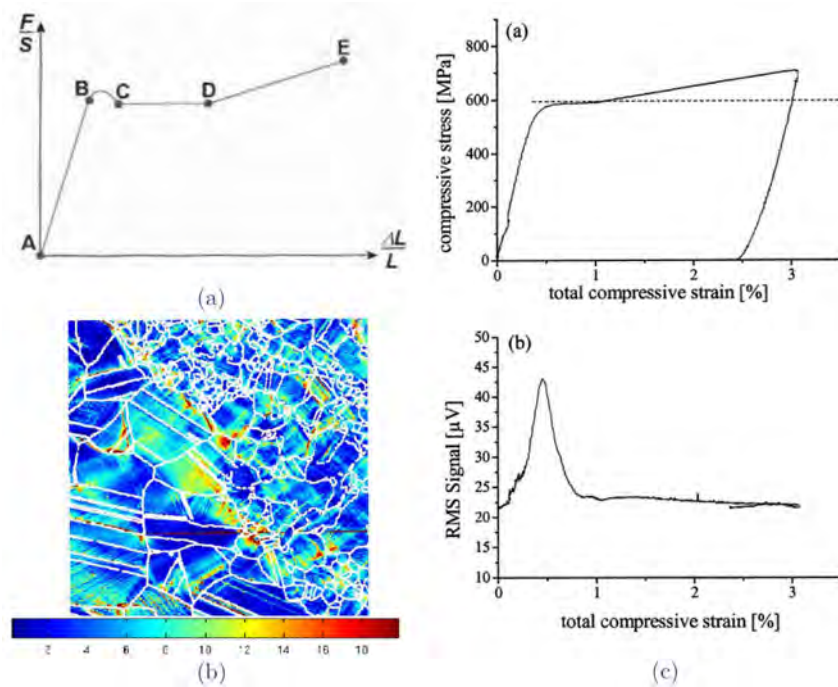


FIGURE 1.13 – Caractéristique du comportement mécanique et de la déformation associée de la microstructure presque- $\gamma$ . (a) Schéma du comportement contrainte-déformation macroscopique, (b) Carte des déformations équivalentes à la surface d'un échantillon testé en compression jusqu'à 5 % macroscopique [Hériprié, 2006], (c) Résultats d'un essai de compression réalisé sur une microstructure presque- $\gamma$  et de l'évolution du signal d'émission acoustique associé [Kauffmann et al., 2000b].

Plus récemment, un essai de traction *in situ* dans un synchrotron a été réalisé par [Erdely et al., 2018] sur une plaque laminée de TiAl avec une microstructure presque- $\gamma$  triphasée afin de quantifier la déformation dans chaque phase en présence ( $\gamma$ ,  $\alpha_2$ ,  $\beta_0$ ) en évaluant la distorsion du réseau cristallin. En termes de réponse contrainte-déformation, les mêmes étapes que celles présentées en Figure 1.13.a sont observées, et le scénario de déformation retenu confirmé. La phase  $\alpha_2$  se déforme plastiquement (légèrement) à partir de la phase de consolidation (DE), tandis que la phase  $\beta_0$  se déforme uniquement élastiquement.

### Microstructure duplex

Ce type de microstructure a été relativement peu étudié par rapports aux autres. Deux exemples de courbes contrainte-déformation issues d'essais de traction réalisés sur des microstructures duplex sont présentés en Figure 1.14. La caractéristique principale du comportement semble être une distinction nette entre le domaine élastique et le domaine plastique. La courbe bleue est issue d'un essai *in situ* MEB réalisé par [Jiang et al., 2009] sur une microstructure duplex contenant approximativement 50 % de grains  $\gamma$  et 50 % de colonies lamellaires. La réalisation de corrélations d'images leur a permis d'observer de la déformation plastique, uniquement pour des contraintes appliquées supérieures à la limite d'élasticité. La répartition de la déformation au travers des grains  $\gamma$  et colonies lamellaires n'a pas été étudiée et reste à ce jour inconnue.

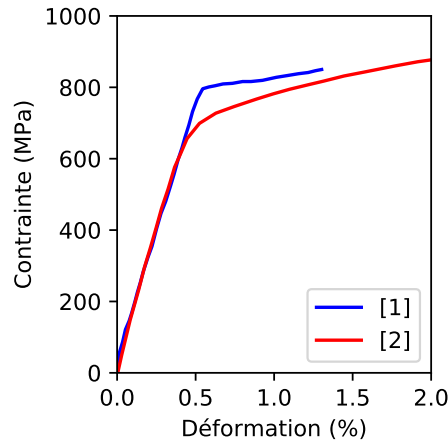


FIGURE 1.14 – Résultats d’essais de traction réalisés sur des microstructures duplex avec [1] = [Jiang et al., 2009] et [2] = [Couret et al., 2008].

### Microstructure presque-lamellaire et lamellaire

Ces microstructures étant celles d’intérêt pour les applications industrielles des alliages TiAl grâce à leur excellente résistance au fluage, elles ont fait l’objet de nombreux travaux.

Les premières études micromécaniques réalisées par [Gélébart, 2002] et [Héripéré, 2006] ont révélé une importante localisation de la déformation. Deux exemples de cartes de déformation issus d’essais de compression sont présentés en Figure 1.15. En adoptant une vision au loin de l’échantillon (Figure 1.15.(a)), des bandes de localisation orientées d’environ 45° par rapport à l’axe de chargement sont observées. En adoptant une vision locale (Figure 1.15.(b)), ces bandes sont associées à la déformation des colonies orientées en mode mou. L’anisotropie plastique des colonies lamellaires joue donc un rôle essentiel sur la localisation de la déformation dans la microstructure.

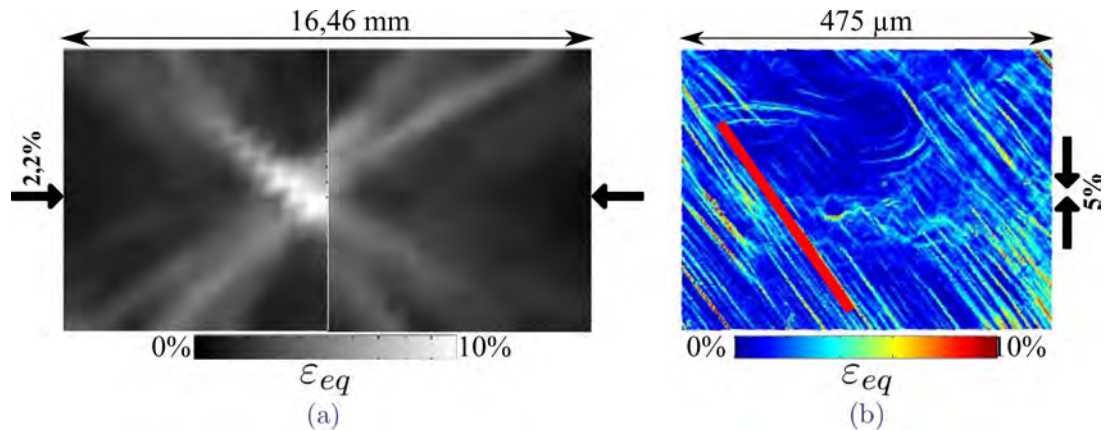


FIGURE 1.15 – Cartes des déformations équivalentes à la surface de microstructures lamellaires calculées à partir des résultats de corrélation d’images. Les flèches indiquent le sens du chargement par rapport à la zone observée avec le niveau de déformation macroscopique associé. (a) Vision globale d’un échantillon comprimé issue de [Gélébart, 2002]. On observe des bandes de localisations orientées à environ 45°. (b) Vision locale dans une colonie lamellaire obtenue *in situ* MEB par [Héripéré, 2006], le plan d’interface apparent est indiqué par le trait rouge. On observe une déformation importante dans cette colonie favorablement orientée.

Plus récemment, [Edwards, 2018b] a étudié la déformation des microstructures lamellaires à 20 °C et 700 °C via la réalisation d’essais *in situ* MEB avec une très haute résolution : la déformation mesurée est de l’ordre du nanomètre [Edwards et al., 2017]. Un exemple des résultats obtenus à 20 °C est présenté en Figure 1.16.(a). À 20 °C comme à 700 °C, des bandes de localisation de la déformation orientées à 45° sont observées et associées aux colonies en mode mou. Néanmoins, de la déformation est observée dans toutes les colonies [Edwards et al., 2019a]. Ainsi, lorsque l’échantillon est déformé pour des contraintes supérieures à  $\sigma_{0,2\%}$ , la déformation n’est pas binaire : on retrouve des mécanismes de déformation variés dans les colonies. Par exemple, une colonie en mode dur par rapport à l’axe de chargement peut se déformer en mode mou grâce à la redistribution des contraintes internes liées à la déformation de colonies voisines.

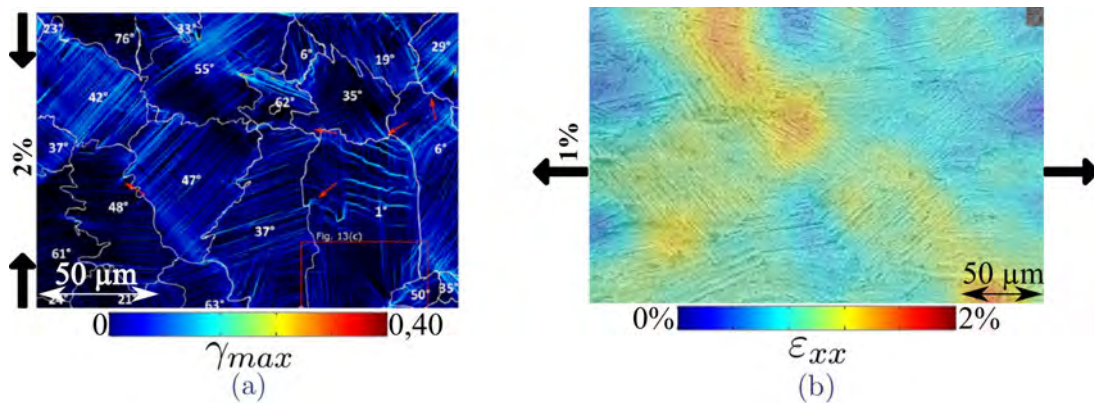


FIGURE 1.16 – (a) Localisation de la déformation dans une microstructure totalement lamellaire issue d’une corrélation haute résolution réalisée par [Edwards et al., 2019a]. Les colonies les plus déformées sont celles orientées à environ 45°, mais de la déformation est aussi observée dans celle à 1° aussi (mode dur). (b) Observation de la localisation de la déformation par [Jiang et al., 2009]. La déformation se concentre dans les colonies orientées à 45°.

Dans les études présentées jusqu’à maintenant, la déformation appliquée est élevée ( $>1\%$ ). Plusieurs auteurs rapportent que le comportement des microstructures lamellaires est très différent dans le régime pré-plastique (contrainte inférieure à  $\sigma_{0,2\%}$ , la limite d’élasticité conventionnelle à 0,2 %).

Par exemple, [Jiang et al., 2009] ont étudié la déformation d’une microstructure lamellaire dans ce régime via la réalisation d’essais de traction *in situ* MEB (Figure 1.16/(b)). Une déformation significative des colonies en mode mou bien avant  $\sigma_{0,2\%}$  a été observée.

Grâce à des moyens de mesure haute résolution, [Edwards et al., 2019b] ont observé de la déformation plastique pour une contrainte correspondant à 64 % de la limite d’élasticité  $\sigma_{0,2\%}$ , et ce exclusivement dans les colonies en mode mou. Ces zones initiales de plasticité ne sont pas nécessairement celles où la rupture est observée pour les chargements monotones étudiés. Par contre, l’auteur suppose que ces zones d’activité plastique peuvent affecter les propriétés en fatigue des alliages TiAl.

### Remarques

La taille des colonies lamellaires ( $>100\ \mu\text{m}$ ) pose soucis lors de la réalisation d’essais *in situ* car elle ne permet pas d’obtenir une résolution élevée pour une zone d’étude suffisamment représentative, c’est-à-dire contenant plus d’une dizaine de colonies. De plus, du fait des relations de symétrie entre les lamelles et compte tenu de leur épaisseur, cartographier par diffraction d’électrons rétrodiffusés (EBSD) une zone contenant plusieurs colonies nécessite un travail conséquent

de traitement de données.

Pour finir, la mesure de la déformation par des essais *in situ* au synchrotron dans des microstructures lamellaires semble pour le moment inaccessible du fait de la difficulté à reconstruire la structure lamellaire et à différencier les différents variants de lamelles  $\gamma$  [Geoffroy, 2013].

## 1.2 Fatigue des alliages TiAl

Dans cette section, les différentes propriétés d'intérêt pour la fatigue sont abordées successivement : le comportement mécanique sous sollicitation cyclique, les mécanismes d'amorçage de fissures, puis la propagation de celles-ci. Dans un dernier point, les résultats de campagnes de fatigue sont présentés et discutés.

### 1.2.1 Comportement mécanique des alliages TiAl sous sollicitations cycliques

#### 1.2.1.1 Analyse macroscopique

L'étude de la tenue en fatigue présuppose d'avoir des informations sur le comportement cyclique du matériau, qui est généralement caractérisé à partir d'essais macroscopiques pilotés en déformation sur des éprouvettes cylindriques. Il peut être parfois compliqué de traiter l'ensemble de l'histoire contrainte-déformation pour des essais longs, c'est pourquoi seule l'évolution de l'amplitude de la contrainte en fonction du nombre de cycles est indiquée dans la plupart des études. Plus rarement, des analyses des boucles d'hystérésis sont proposées [Polák et al., 2016].

Dans le cas des alliages TiAl, il est délicat de dégager des tendances à partir des résultats de la littérature à cause de la diversité des alliages étudiés et de la variabilité des procédés de fabrication et des microstructures associées. Les paragraphes ci-dessous sont le fruit de l'analyse des références suivantes [Christ et al., 2001, Gloanec et al., 2005, Berteaux et al., 2006, Bauer and Christ, 2009, Satoh et al., 2010, Heckel and Christ, 2010, El-Chaikh et al., 2013, Schallow and Christ, 2013, Kruml and Obrtlík, 2014, Naanani, 2018]. Les températures données à titre indicatif peuvent varier d'environ 50 °C selon l'alliage étudié du fait des différences de composition chimique. Un exemple typique de l'évolution de l'amplitude de la contrainte en fonction du nombre de cycles à différentes températures est présenté en Figure 1.17.

Dans le cas de chargements alternés ( $R_\epsilon = -1$ ), les études montrent des résultats disparates pour les températures inférieures à environ 700 °C : c'est parfois un durcissement cyclique qui est observé, parfois un adoucissement, et parfois une stabilisation immédiate. Sur la Figure 1.17, c'est un durcissement qui est observé jusqu'à 650 °C. Pour des températures situées entre 700 °C et 800 °C, le comportement est plus clair : le cycle stabilisé est atteint immédiatement et l'évolution de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles est plate. Pour les températures supérieures ou égales à 800 °C, un adoucissement cyclique continu jusqu'à rupture est observé.

Enfin, le comportement sous sollicitation non alternée a été peu étudié, il est donc difficile de déterminer des tendances comme nous avons pu le faire pour  $R_\epsilon = -1$ . La revue bibliographique n'a pas permis d'établir un lien entre la microstructure étudiée et le comportement cyclique.

En analysant des boucles d'hystérésis issues d'un essai réalisé sur une microstructure lamellaire, [Satoh et al., 2010] ont suspecté la présence d'une importante contrainte de retour liée à une déformation hétérogène dans la microstructure. [Hoppe and Appel, 2014] pensent que la déformation précoce des colonies lamellaires en mode mou pourrait être responsable cette contrainte de retour.

La grande majorité des études portant sur le comportement cyclique ne font pas mention de l'effet Bauschinger, caractéristique du comportement mécanique des matériaux métalliques sous sollicitation cyclique. Cet effet se manifeste comme une réduction de la limite élastique  $\sigma_0$  qui



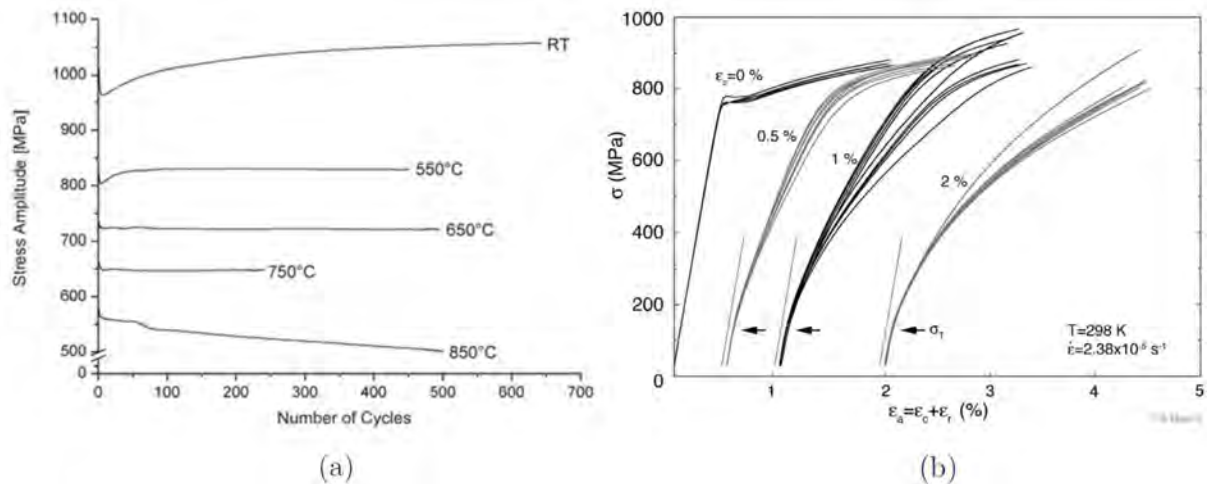


FIGURE 1.17 – (a) Évolution de l’amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles pour des chargements alternés pilotés en déformation à différentes température issues de [Heckel and Christ, 2010]. (b) Évolution de la contrainte en fonction de la déformation lors d’essais de traction sur des éprouvettes avec différents niveaux de pré-compression [Paul et al., 2016].

devient  $\sigma_c$  lors de l’inversion du sens de chargement tel que  $|\sigma_c| < |\sigma_0|$  [Bauschinger, 1886]. [Paul et al., 2016] ont démontré qu’un effet Bauschinger significatif est présent dans le cas des alliages TiAl. Pour cela, des éprouvettes ont été usinées dans des lingots de TiAl ayant subit différents niveaux de pré-compression  $\epsilon_c$  avant d’être testées en traction. Les résultats de ces essais sont présentés en Figure 1.17.(b). Les éprouvettes n’ayant pas subit de pré-compression ont une limite d’élasticité initiale d’environ 750 MPa, tandis que les autres ont une limite d’élasticité d’environ 200 MPa. C’est ce qui est appelé un adoucissement transitoire dans les études portant sur l’effet Bauschinger [Choteau, 1999].

L’effet Bauschinger se manifeste donc par un adoucissement transitoire prononcé qui était jusqu’alors passé inaperçu. On observe d’ailleurs sur la Figure 1.17.(a) qu’une diminution de l’amplitude de contrainte est observée à 20 °C et 550 °C lors des premiers cycles, ce qui est peut être le signe de la présence d’un adoucissement transitoire.

### 1.2.1.2 Mécanismes de déformation

La plupart des travaux cités ci-dessus sont accompagnés d’analyses des mécanismes de déformation par l’étude de lames minces en Microscopie Électronique à Transmission (MET). Les mécanismes de déformation sous sollicitation cyclique sont identiques à ceux présentés en sous-section 1.1.4 [Appel et al., 2010].

Pour les températures inférieures à 700 °C, lorsqu’il y a un écrouissage, celui-ci est relié à la faible mobilité des dislocations, à l’enchevêtrement dense de dipôles et à l’interaction avec les macles [Bauer and Christ, 2009]. Si des conditions de chargement favorables sont appliquées, une structure veine peut se former [Gloanec et al., 2007]. L’évolution de la structure de dislocation en fonction du chargement appliqué à température ambiante est présenté en Figure 1.18.(a). [Gloanec et al., 2005] confirment via leurs observations au MET que l’on retrouve au cœur de l’éprouvette la classification par mode de déformation issue des essais sur cristaux PST. Dans les lames minces étudiées, la déformation est qualifiée d’homogène, ce qui confirme que l’hétérogénéité locale de la déformation est très dépendante du niveau de chargement appliqué.

Pour les températures entre 700 °C et 750 °C (ou 800 °C selon l’alliage), l’absence d’écrouissage et la stabilisation immédiate du comportement reflètent la facilitation du mouvement des

dislocations causée par l'activation du glissement dévié et la montée des dislocations [Hénaff and Gloanec, 2005].

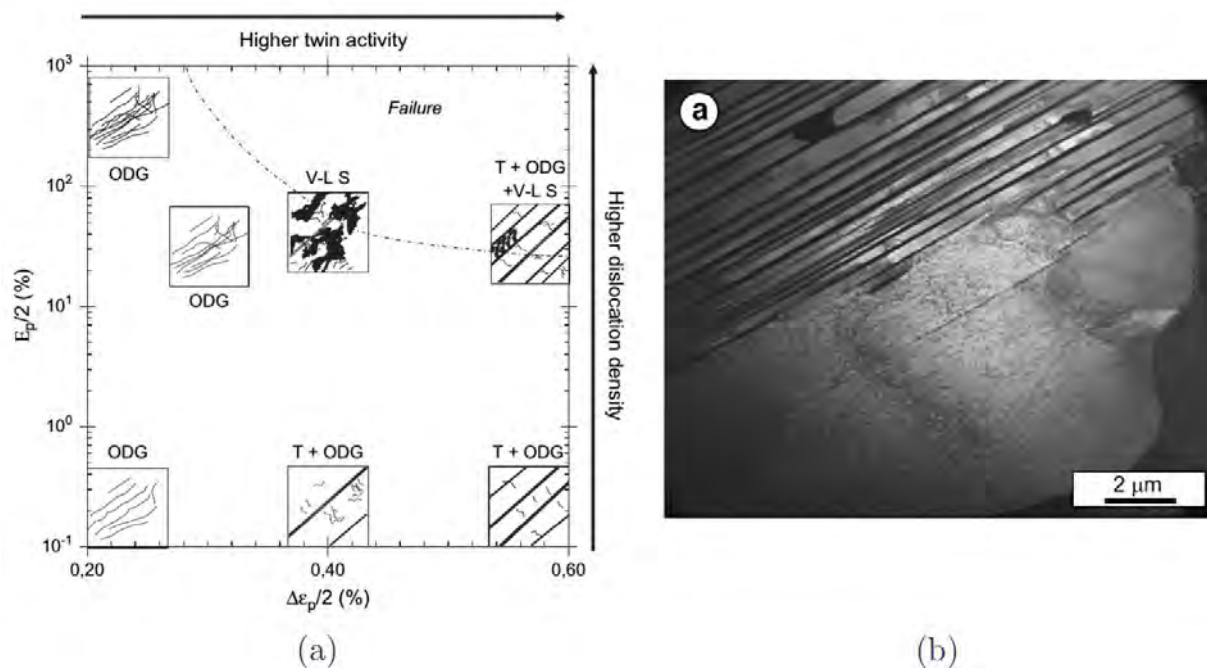


FIGURE 1.18 – (a) Évolution de la structure de dislocation en fonction du chargement appliqué issue de [Gloanec et al., 2007]. "ODG", "T" et "V-L S" désignent respectivement les dislocations ordinaires, le maillage et la structure veine.  $\varepsilon_p/2$  est la déformation totale appliquée, et  $E_p/2$  la déformation plastique cumulée. (b) Micrographie MET issue de [Kruml and Obrtlík, 2014] d'une colonie lamellaire partiellement détruite à 750 °C du fait de l'action combinée de la température et du chargement cyclique appliqué.

Enfin, au delà de 750 °C (ou 800 °C), la microstructure lamellaire se dégrade progressivement : les lamelles de phase  $\alpha_2$  se transforment en grains  $\gamma$ , entraînant ainsi la perte des propriétés mécaniques qu'offrent la structure lamellaire [Kruml and Obrtlík, 2014]. Un exemple de colonie lamellaire transformée en grain  $\gamma$  par l'action combiné du chargement et de la température est présenté en Figure 1.18.(b). On parle de transformation de phase et de recristallisation dynamique [Ding et al., 2017]. L'adoucissement cyclique observé est à associer à l'accélération de la dégradation de la structure lamellaire. Empêcher ou atténuer cette modification microstructurale est un des verrous à lever pour l'augmentation de la température d'utilisation du matériau [Kim and Kim, 2018].

## 1.2.2 Identification des sites et mécanismes d'amorçage de microfissures de fatigue

La sollicitation cyclique des matériaux entraîne l'amorçage de microfissures (ou fissures courtes) de fatigue qui, après coalescence, vont former une fissure longue ( $\approx 1$  mm) dont la propagation entraîne la rupture de l'éprouvette [Chan, 2010]. Cette phase d'amorçage, qui combine les périodes d'amorçage et de coalescence, est prépondérante sur la durée de vie en fatigue à grand nombre de cycles [Mughrabi, 2013].

Dans cette sous-section, différents travaux de la littérature sont analysés afin de répertorier les sites d'amorçage de microfissures de fatigue dans les microstructures des alliages TiAl. Ces observations sont ensuite interprétées pour déterminer les mécanismes responsables de ces amorçages.

### 1.2.2.1 Sites d'amorçage

On considère d'abord les travaux dans lesquels des essais de traction interrompus sont réalisés à des niveaux de contrainte proches de la limite d'élasticité. Ces études sont intéressantes pour déterminer les sites d'amorçage liés à la montée en charge. L'interruption de l'essai permet d'analyser l'échantillon pour détecter les premières fissures avant d'augmenter le niveau de charge.

[Botten et al., 2001] ont réalisé ce type d'essais sur une microstructure totalement lamellaire pour des contraintes inférieures à  $\sigma_{0,2\%}$  (donc dans des domaines d'intérêt pour la fatigue). Ils ont observé au MEB des fissures intralamellaires situées exclusivement à l'intérieur des colonies orientées en mode mou ( $45^\circ$  par rapport à l'axe de chargement) et en mode dur ( $90^\circ$  par rapport à l'axe de chargement).

Ces résultats sont à mettre en relation avec ceux de [Edwards et al., 2019b] présentés en sous-section 1.1.5, où pour le même type de chargement, de la déformation plastique est mesurée uniquement pour les colonies en mode mou qui semblent donc être des sites propices d'amorçage.

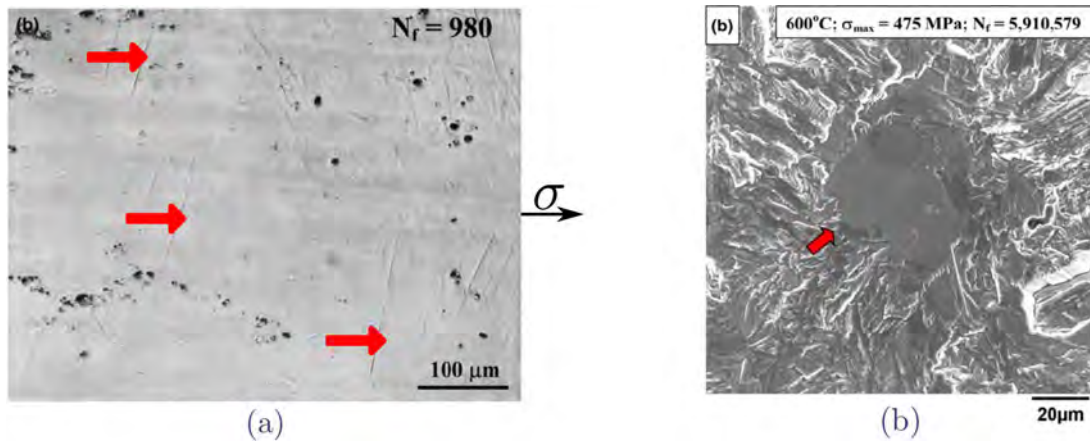


FIGURE 1.19 – (a) Surface polie d'une éprouvette de fatigue sur laquelle on observe l'apparition de microfissures dans les colonies favorablement orientées [Jha et al., 2005]. (b) Analyse fractographique au MEB d'une éprouvette fatiguée. Le site d'initiation de la fissure ayant entraînée la rupture correspond à une colonie en mode dur [Jha et al., 2005].

Récemment, [Löffl et al., 2019] ont réalisé ce type d'essais sur une microstructure lamellaire mais sans décharge, dans la chambre d'un microtomographe aux rayons X. Une éprouvette cylindrique est chargée jusqu'à une contrainte donnée, la contrainte est maintenue, l'éprouvette scannée, puis le niveau de contrainte augmenté. Le processus est répété jusqu'à rupture. Un amorçage à cœur est observé dans ce qu'il semble être une colonie en mode mou.

Il est important de noter que les premières fissures ne sont pas forcément celles qui entraînent la ruine dans le cas de chargement cyclique. On s'intéresse donc maintenant aux travaux où le matériau est soumis à des chargements cycliques.

[Jha et al., 2005] ont réalisé une campagne de fatigue sur une microstructure presque-lamellaire avec un ratio  $R_\sigma = 0,1$ . Au cours de l'essai, des microfissures sont observées dans les colonies orientées en mode mou à la surface de l'échantillon (voir Figure 1.19.(a)). L'analyse fractographique confirme que ces sites peuvent entraîner l'amorçage d'une fissure longue, et donc piloter la durée de vie. Au cœur de l'éprouvette, les colonies orientées en mode dur ( $90^\circ$ ) sont aussi identifiées comme des sites d'amorçages privilégiés (voir Figure 1.19.(b)). Ce site d'amorçage est sûrement lié aux incompatibilités de déformation entraînées par la présence de ces colonies. Les auteurs concluent que la durée de vie en fatigue des alliages TiAl est pilotée

par la compétition entre les mécanismes d’amorçages de fissure de fatigue en surface et à cœur de l’éprouvette.

Les sites d’amorçage en fatigue d’une microstructure duplex ont été étudiés par [Niendorf et al., 2009] via la réalisation d’essais sur éprouvette plate avec suivi de la déformation en surface par corrélation d’images à température ambiante et à 700 °C. À température ambiante, de multiples zones de localisation de la déformation sont observées au centre et sur les bords de l’éprouvette, alors qu’à haute température la localisation se fait uniquement sur un bord de l’éprouvette. Comme aucune analyse microstrucurale n’est réalisée, les zones de localisation ne sont pas associées à des caractéristiques de la microstructure.

[Patriarca et al., 2016, Beretta et al., 2014, İçöz et al., 2014] ont quant à eux étudié la localisation de la déformation à la surface d’une microstructure duplex via la réalisation d’essais micromécaniques de fatigue (traction répétée  $R_\sigma = 0$ ) sous un microscope optique. Une importante accumulation de la plasticité est observée avec l’augmentation du nombre de cycles dans les colonies lamellaires en mode mou. Les cartes de corrélation sont présentées en Figure 1.20 pour 500 cycles puis 3500 cycles.

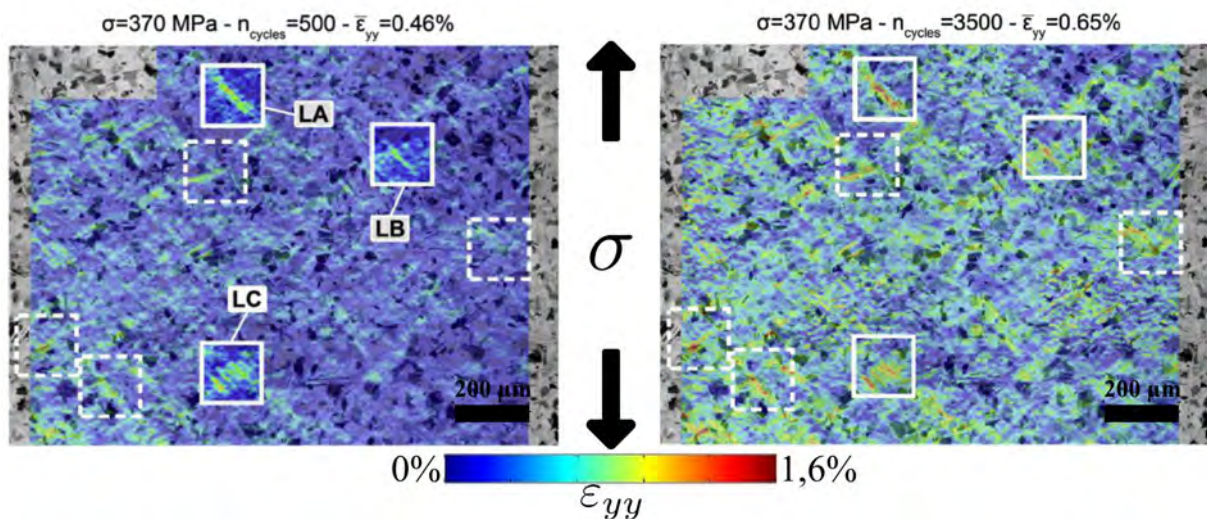


FIGURE 1.20 – (a) Cartes des déformations en surface réalisées à la décharge après 500 et 3500 cycles d’un échantillon fatigué en traction répétée ( $R_\sigma = 0$ ) issues de [Patriarca et al., 2016].

Les colonies en mode mou sont parmi les premières activées et celles où le plus de plasticité s’accumule.

### 1.2.2.2 Analyse des mécanismes d’amorçage

L’amorçage de fissures de fatigue semble être principalement lié à des mécanismes intralamellaires, c’est-à-dire au sein d’une même colonie lamellaire. Les colonies en mode mou semblent être des sites privilégiés du fait de leur activité plastique. Il y a donc un lien clair entre plasticité et amorçage de fissures de fatigue comme présenté en Figure 1.21.(a). Les mécanismes causant ces fissures sont liés aux incompatibilités de déformation aux interfaces, principalement  $\gamma$ - $\alpha_2$  mais aussi  $\gamma$ - $\gamma$ . La présence de microfissures en surface est très probablement causée par des phénomènes d’intrusion-extrusion, bien que ceux-ci n’aient pas été étudiés dans le cas des TiAl [Karuskevich et al., 2012]. Un schéma expliquant ce phénomène est présenté en Figure 1.21.(c) : les colonies en mode mou à la surface peuvent se déformer vers l’extérieur, et donc s’extruder, ce qui est néfaste notamment à haute température du fait des interactions avec l’environnement (i.e. oxydation). L’anisotropie plastique importante fait que ce phénomène peut

apparaître dès les premières du chargement.

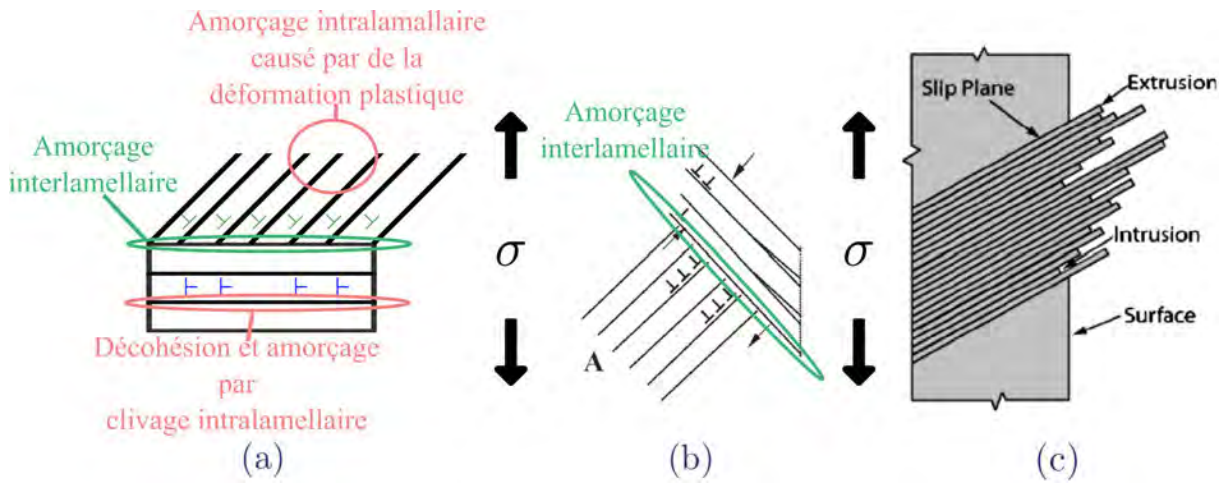


FIGURE 1.21 – Schéma représentant les mécanismes d’amorçage déterminés et suggérés par l’étude bibliographique. (a) Mécanismes impliquant les colonies en mode dur et en mode mou définies sur la base de l’étude bibliographique. (b) Mécanismes d’amorçage interlamellaire impliquant des colonies en mode mou adapté de [Wu et al., 2001]. (c) Mécanismes d’intrusion-extrusion en surface [Karuskevich et al., 2012].

Les raisons pour lesquelles les colonies en mode dur ( $90^\circ$ ) seraient aussi des sites privilégiés sont moins évidentes. Les essais sur monocristaux ont montré que leur limite d'élasticité est cinq fois supérieure à celle des colonies en mode mou et que leur ductilité en traction est quasi nulle. Un amorçage par clivage lié à une absence de déformation plastique semble donc possible, possiblement favorisé par l'activation soudaine du maillage transverse qui, par empilement de dislocations de macles, crée des contraintes internes entraînant une décohésion lamellaire comme présenté en Figure 1.21.(a).

Un autre mécanisme pourrait être l'interaction avec des colonies voisines très déformées. Si les dislocations dans une colonie bien orientée viennent interagir perpendiculairement au plan d'interface d'une autre colonie, un amorçage interlamellaire intervient comme en Figure 1.21.(a). Ce dernier mode interlamellaire est valable pour plusieurs configurations critiques, comme sur l'autre exemple schématisé en Figure 1.21.(b).

Enfin, si le rôle des colonies lamellaires a été beaucoup étudié, l'impact des phases plus petites (grains  $\gamma$ ,  $\alpha_2$ ,  $\beta_0$ ) sur l'amorçage de microfissures dans les microstructures multiphasées (duplex, presque-lamellaire) n'est pas connu et reste à l'état de supposition. [Edwards, 2018a] suppose que dans les microstructures presque-lamellaires, les grains  $\gamma$  pourraient être des sites privilégiés d'amorçage vu qu'ils peuvent se déformer sans restriction. [Leitner et al., 2014] montrent par la réalisation d'essais de fissuration que la présence de phase  $\beta_0$  favorise l'apparition de microfissures du fait des incompatibilités de déformation qu'elle engendre. L'étude bibliographique n'a pas permis d'identifier les causes d'amorçage de fissures de fatigue dans les microstructures presque- $\gamma$ , qui ont, à ce jour, été peu étudiées.

### 1.2.3 Propagation de fissures de fatigue

La phase de propagation de fissures longues pilote la durée de vie en fatigue oligocyclique. Quelque soit la microstructure ou l'alliage étudié, la résistance des alliages TiAl à cette propagation de fissures longues est mauvaise : leur propagation est quasi-instantanée. C'est pourquoi le seuil initial de propagation est un critère de dimensionnement critique pour les alliages TiAl.

L'évolution de la vitesse de propagation en fonction du facteur d'intensité des contraintes de plusieurs alliages est présentée en Figure 1.22. Sur ce graphique, on observe que les microstructures lamellaires ont des seuils de propagation élevés (i.e. ce sont les courbes plus à droite sur le graphique) et résistent mieux à la propagation de fissure (la pente change) que les microstructures presque- $\gamma$  et duplex (à gauche sur le graphique, droites quasiment verticales).

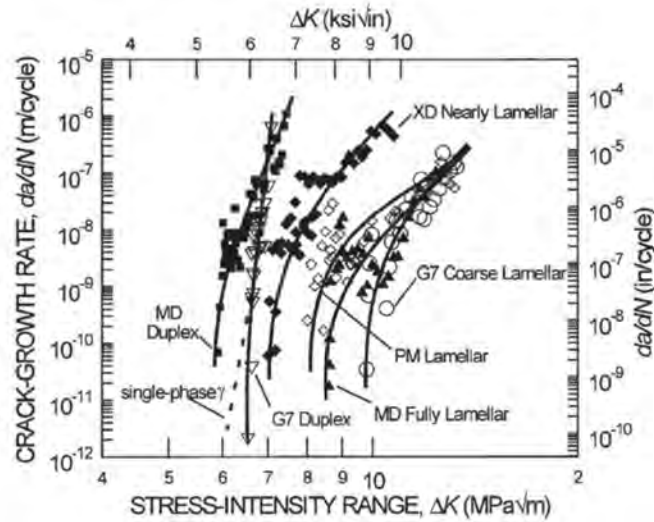


FIGURE 1.22 – Évolution de la vitesse de propagation en fonction de l'amplitude du facteur d'intensité des contraintes pour différents alliages (tiré de [Edwards, 2018a]).

Comme introduit précédemment, il existe une phase de propagation de microfissures ( $\approx$ taille des grains) avant la phase de propagation de fissures longues ( $\approx 1$  mm). [Wessel et al., 2015] ont étudié cette phase dans le cas des alliages TiAl via le suivi de microfissures à la surface d'éprouvettes plates au cours d'essais de fatigue sur différentes microstructure. Un exemple des résultats obtenus sur une microstructure lamellaire est présenté en Figure 1.23. Trois étapes sont identifiées : au début la fissure est contenue dans une colonie, avant de trouver un chemin favorable pour se propager dans la colonie voisine, puis de grandir et devenir une fissure longue. Pour devenir une fissure longue, une microfissure doit donc franchir la première barrière microstructurale majeure. La multiplication des interfaces dans les microstructures lamellaires permet d'inhiber cette première phase de propagation. Dans le cas des alliages TiAl, il semble donc que la phase d'amorçage (amorçage et propagation de microfissures) représente une partie significative de la durée de vie pour des régimes de fatigue où la durée de vie finale  $N_f > 10^4$  cycles [Edwards, 2018a].

#### 1.2.4 Analyse de campagnes de fatigue

Différentes campagnes de fatigue ont été réalisées sur des alliages TiAl d'intérêt, la plupart du temps avec des essais pilotés en déformation avec des rapports de charge  $R_\epsilon = -1$  et sous air.

Plusieurs auteurs rapportent que la durée de vie des alliages TiAl ne diminue pas avec la température, mais tend à augmenter [Jha et al., 2005, Bauer and Christ, 2009, Gloanec et al., 2010, Kruml and Obrtlík, 2014]. C'est par exemple le cas sur la Figure 1.24.(a). [Christ et al., 2001] ont observé que si la durée de vie augmente bien avec la température lorsque les essais sont réalisés sous air, celle-ci diminue avec la température lorsque les essais sont réalisés sous vide. Ce résultat a été attribué à des interactions avec l'environnement (vapeur d'eau et corrosion), qui seraient néfastes à basse température et favoriseraient des mécanismes de rupture fragile.

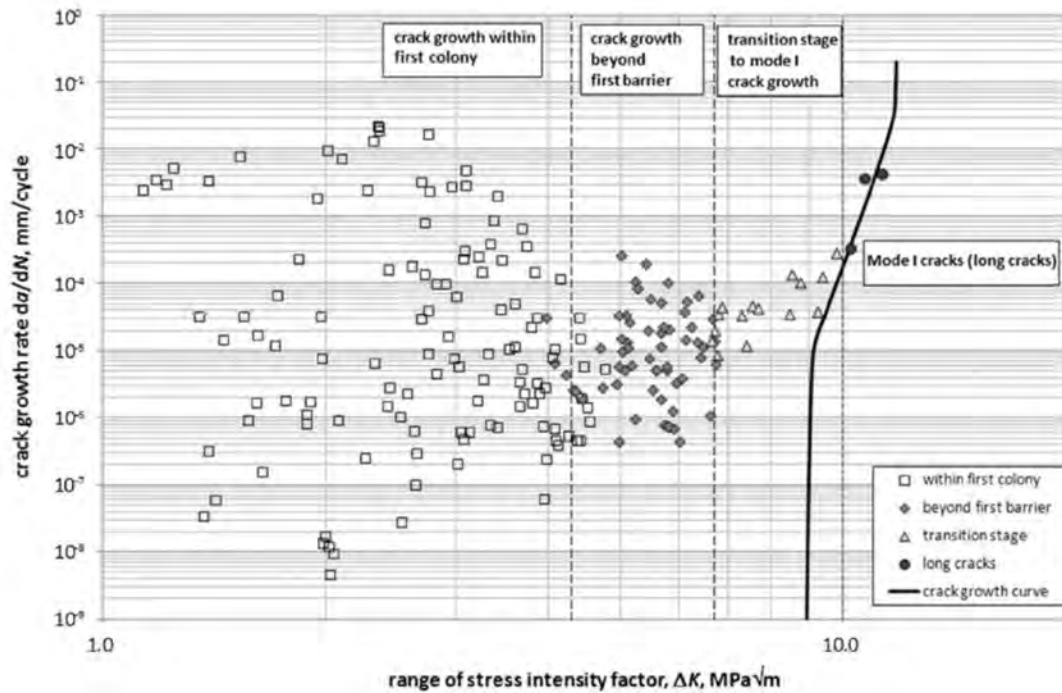


FIGURE 1.23 – Évolution de la vitesse de propagation de microfissures en fonction de l’amplitude du facteur d’intensité des contraintes [Wessel et al., 2015].

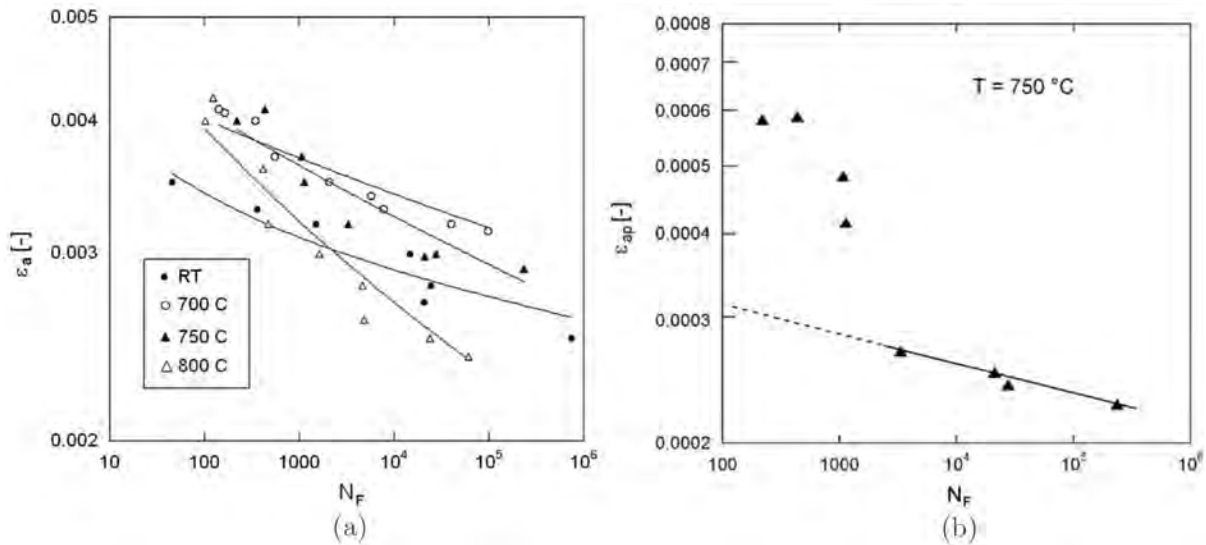


FIGURE 1.24 – Résultats de la campagne de fatigue de [Kruml and Obrtlík, 2014] réalisée sur une microstructure lamellaire avec  $R_\epsilon = -1$  à différentes températures. (a) Évolution de l’amplitude de déformation appliquée en fonction de la durée de vie. (b) Évolution de la déformation plastique appliquée en fonction de la durée de vie avec à 750 °C.

Dans le cas des microstructures lamellaires, une dépendance importante de la durée de vie vis-à-vis de la déformation appliquée a été mise en évidence par [Park et al., 2002, Kruml and Obrtlík, 2014]. Un diagramme de Manson-Coffin (déformation plastique appliquée en fonction du nombre de cycles) issu de [Kruml and Obrtlík, 2014] est présenté en Figure 1.24.(b). Une légère modification de la déformation appliquée entraîne le passage soudain d’un régime de fatigue à

grand nombre de cycles vers un régime à faible nombre de cycles. Les mécanismes à l'origine de cette transition abrupte sont inconnus, mais les auteurs les pensent reliés à la microstructure.

Pour terminer, il semble qu'à partir de la température où de l'adoucissement cyclique est observé, la durée de vie diminue drastiquement. Cette diminution est attribuée à la dégradation de la structure lamellaire [Kruml and Obřtlík, 2014].

### 1.3 Modélisation du comportement mécanique par calcul sur microstructure & applications aux alliages TiAl

Le calcul sur microstructure dans le cadre général de la mécanique des milieux continus est aujourd'hui une discipline à part entière [Cailletaud et al., 2003]. Cette approche dite micromécanique combine le calcul de structure et la science des matériaux pour répondre à des objectifs variés comme la compréhension de la déformation locale dans un matériau, la prédiction des propriétés de matériaux hétérogènes ou l'analyse des causes d'endommagement local. On considère ces approches valides pour décrire des phénomènes jusqu'à 1  $\mu\text{m}$ .

Deux méthodes numériques sont couramment utilisées pour la réalisation des simulations : la méthode des éléments finis (MEF) et une méthode basée sur l'utilisation de la transformée de Fourier rapide (FFT) [Moulinec and Suquet, 1998]. Dans un souci de simplification, cette dernière méthode n'est pas discutée par la suite car elle n'est pas utilisée dans les travaux menés. On souligne néanmoins que son utilisation semble réduire de manière significative les temps de calcul tout en permettant la résolution de cas complexes [Lebensohn et al., 2008, Robert and Mareau, 2015, Rovinelli et al., 2020].

Dans cette section, les techniques de modélisation du comportement mécanique via la réalisation de calculs sur microstructure sont introduites. Cela implique la description de la microstructure, la loi de comportement locale permettant de décrire le comportement anisotrope des cristaux, et les techniques d'homogénéisation. L'état actuel des applications au cas des alliages TiAl est détaillé.

#### 1.3.1 Généralités du calcul sur microstructure

##### 1.3.1.1 Description d'une microstructure

Modéliser le comportement mécanique d'une microstructure implique la génération d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de celle-ci. Deux méthodes de construction d'un VER peuvent être distinguées :

- la reconstruction exacte d'une microstructure donnée, c'est-à-dire d'un unique arrangement. Sur la base de résultats expérimentaux, l'objectif est de créer un modèle numérique parfaitement représentatif de la géométrie de l'arrangement étudié et de sa texture cristallographique. Un exemple est présenté en Figure 1.25 avec la reconstruction exacte en 3D d'une microstructure scannée par microtomographie issue de [Proudhon et al., 2018]. On précise qu'il est bien plus courant de le faire en 2D à partir d'une cartographie EBSD, ce qui pose alors la question du rôle de la microstructure inconnue dans la profondeur [Zeghadi et al., 2007].
- la reconstruction aléatoire statistiquement représentative d'une microstructure. Une microstructure est caractérisée par sa distribution de taille de grains, par la morphologie des grains, par sa texture, ainsi que par la fraction volumique des phases constituantes. À partir de ces distributions statistiques, des tessellations (i.e. pavage d'un espace) sont réalisées pour obtenir un VER numérique dit statistiquement représentatif [Quey et al., 2011]. Ainsi pour une même microstructure, différents arrangements locaux statistiquement représentatifs peuvent être générés et étudiés.



Une fois la microstructure virtuelle générée, elle est discrétisée par éléments finis, c'est-à-dire qu'un maillage est créé. Pour la réalisation du calcul, un comportement mécanique local doit alors être attribué aux grains et phases cristallographiques.

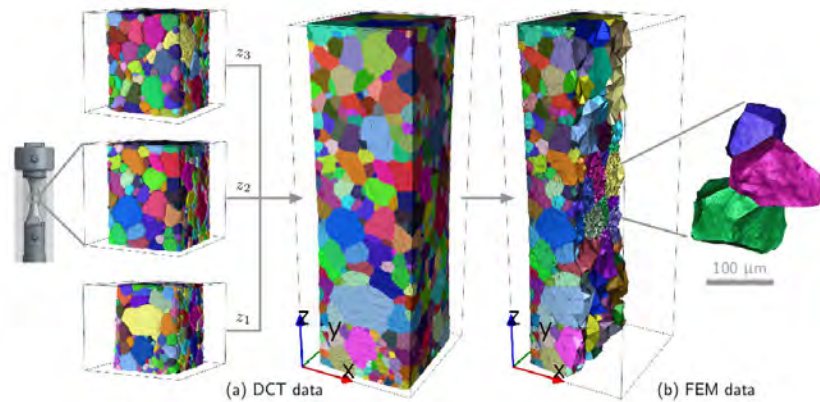


FIGURE 1.25 – Exemple d'une reconstruction exacte d'une microstructure scannée par microtomographie puis maillée par éléments finis issue de [Proudhon et al., 2018]

### 1.3.1.2 Comportement local : loi de plasticité cristalline

On appelle modèle de plasticité cristalline les modèles permettant de décrire le comportement plastique et fortement anisotrope des cristaux par la prise en compte des mécanismes de déformation cristallographique associés [Roters et al., 2010]. Dans un calcul visant à décrire le comportement d'un polycristal, chaque grain est considéré comme un monocristal avec une orientation cristallographique uniforme définie. Le comportement constitutif de ce cristal est décrit par un modèle de plasticité cristalline.

On distingue deux types de modèle de plasticité cristalline dans la littérature :

- les modèles phénoménologiques, basés sur des variables internes d'écrouissage. Ils sont adaptés à la description du comportement sous chargement complexe mais ne décrivent pas explicitement la physique et les phénomènes en jeu, qui sont représentés par des lois d'évolution à identifier ;
- les modèles à base physique, où les variables internes sont basées sur des densités de dislocation, donc plus représentatives des mécanismes réels de déformation.

Quelque soit le type de modèle employé, le principe général des modèles de plasticité cristalline est le suivant. Pour une phase cristallographique donnée avec un tenseur d'élasticité  $\underline{\underline{C}}$ , des systèmes de glissement  $s$  sont définis. Lors de l'application d'un tenseur de contrainte  $\underline{\underline{\sigma}}$ , la cission  $\tau^s$  associée à chaque système est définie comme :

$$\tau_s = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m}}_s \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{m}}_s^l = (\vec{n}_s^l \otimes \vec{l}_s^l + \vec{l}_s^l \otimes \vec{n}_s^l)/2 \quad (1.1)$$

où  $\vec{l}_s^l$  et  $\vec{n}_s^l$  sont respectivement la direction de glissement et le plan de glissement, et  $m_s$  le tenseur d'orientation (ou tenseur de Schmidt). Si la cission résolue  $\tau_s$  est supérieure à la cission critique résolue  $\tau_{0,s}$ , du cisaillement plastique  $\gamma_s$  apparaît sur le système de glissement  $s$ .

La déformation plastique est une combinaison des cisaillements plastiques obtenus sur l'ensemble des systèmes de glissement  $s$ . La déformation totale est alors une combinaison de la déformation plastique et de la déformation élastique. Un schéma issu de [Roters et al., 2010] représentant les différents ingrédients des modèles est présenté en Figure 1.26. On note que différents phénomènes contribuant à la déformation plastique peuvent être ajoutés (transformation

de phase, maillage). Leur prise en compte entraîne une multiplication du nombre de paramètres à identifier en contrepartie.

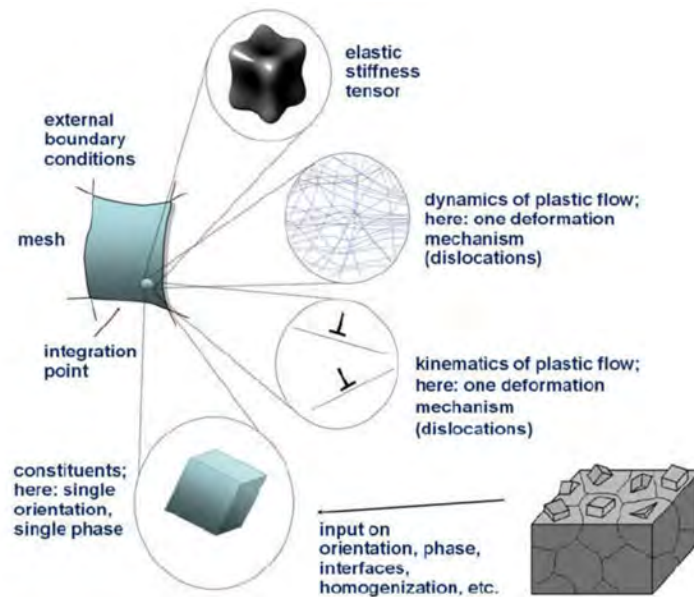


FIGURE 1.26 – Schéma résumant les différents ingrédients d’un modèle de plasticité cristalline issu de [Roters et al., 2010]. En un point du maillage, le grain est défini par son tenseur d’élasticité. Le modèle de plasticité utilisé tient compte de la déformation par dislocation.

### 1.3.1.3 Identification des paramètres

Pour l’identification des paramètres, on retrouve deux écoles qui rejoignent les deux options présentées ci-dessus sur la génération des microstructures virtuelles.

#### Identification basée sur des résultats de mesure de champs

Une première approche consiste à identifier les paramètres directement à partir de résultats d’expériences micromécaniques où l’état de déformation (ou parfois de contrainte) des grains est connu. L’idée est de modéliser exactement l’expérience réalisée, et d’utiliser un algorithme d’optimisation pour identifier les paramètres qui permettent d’obtenir la meilleure cohérence entre simulation et expérience. Ce type d’expérience est complexe à mettre en œuvre. L’exemple le plus courant consiste à utiliser les résultats d’essais micromécaniques, qui correspondent souvent à des cartes de corrélation d’images des déplacements ou des déformations associées [Héripré, 2006, Bertin et al., 2016, Guery et al., 2016].

#### Identification par homogénéisation numérique

Une deuxième approche consiste à réaliser une identification à partir de courbes contrainte-déformation macroscopiques [Cruzado et al., 2017]. L’idée est de générer une microstructure numérique, de la solliciter mécaniquement, puis de calculer la moyenne des champs locaux de contrainte et de déformation sur la microstructure afin d’obtenir une courbe contrainte-déformation macroscopique. C’est ce qui est appelé une homogénéisation numérique.

Une identification peut alors être réalisée, en déterminant les paramètres du modèle qui permettent d’obtenir la meilleure corrélation entre les courbes contrainte-déformation numériques et expérimentales. Cette démarche d’identification nécessite un travail amont pour s’assurer de la

représentativité des résultats, notamment via la définition propre d'un VER. Parfois, l'inconvénient est que plusieurs paramètres sont à identifier à partir d'une unique courbe. En conséquence, plusieurs jeux de paramètres sont potentiellement acceptables.

#### 1.3.1.4 Paramètres influençant les résultats : VER, conditions limites & maillage

De nombreux paramètres des modèles éléments finis peuvent influencer les résultats obtenus. L'étape clé est la définition d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de la microstructure. Un VER est un volume suffisamment grand pour que la variable physique étudiée, moyennée sur tout le volume, ne fluctue plus lorsque la taille du dit volume augmente [Coudon, 2017]. Dans le cas de la modélisation du comportement mécanique par homogénéisation numérique, cela revient à déterminer le nombre de grains à partir duquel la courbe contrainte-déformation est quasi-identique pour différentes réalisations statistiquement représentatives de la même microstructure. Un schéma issu de [Coudon, 2017] illustre ce principe en Figure 1.27.

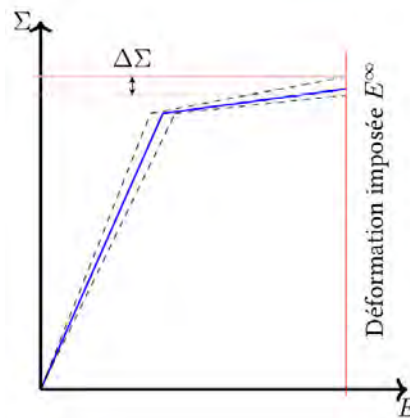


FIGURE 1.27 – Schéma issu de [Coudon, 2017] présentant le principe de représentativité du VER en termes de réponse contrainte-déformation macroscopique pour un essai virtuel piloté en déformation. Un VER existe si pour plusieurs réalisations d'une même microstructure l'écart  $\Delta\Sigma$  est limité.

La taille du VER dépend du matériau considéré, de sa microstructure (phases en présence, texture), ainsi que des conditions aux limites utilisées dans le calcul. Ce sont les conditions aux limites périodiques qui permettent généralement l'utilisation du VER le plus petit [Kanit et al., 2003]. Un calcul avec ces conditions aux limites représente le cas de la microstructure au cœur d'une éprouvette massive.

Pour réaliser une homogénéisation numérique, l'influence de la qualité du maillage sur la réponse macroscopique contrainte-déformation est limitée. Il est alors possible d'utiliser des maillages contenant très peu d'éléments pour identifier les paramètres du modèle de plasticité cristalline [Farooq et al., 2020]. Par contre, si l'objectif est d'étudier la répartition de la contrainte et de la déformation dans la microstructure, il est alors nécessaire d'utiliser un maillage raffiné.

#### 1.3.1.5 Approche analytique : modèles à champs moyens

La discrétisation du VER par éléments finis peut entraîner un temps de calcul important. Des approches analytiques, dites à champs moyens, peuvent être utilisées pour simuler le comportement macroscopique contrainte-déformation d'un polycristal sans le discrétiser explicitement.

Ces approches, basées sur des analyses théoriques, contiennent trois étapes : la localisation d'une contrainte ou d'une déformation macroscopique, le calcul des déformations locales, et

l'étape d'homogénéisation. Un schéma issu de [Martin, 2012] permettant de visualiser le principe général d'un schéma d'homogénéisation dit auto-cohérent est présenté en Figure 1.28.

Le principe est de décomposer le VER de la microstructure d'intérêt par grain. Les champs mécaniques sont supposés homogènes dans chaque grain  $g$  (1 seule valeur de déformation et de contrainte par grain). Le problème d'une inclusion (le grain) dans un milieu homogène équivalent (MHE) est alors résolu. Ce MHE représente une moyenne des propriétés élastiques de tous les grains déterminée au préalable. L'étape d'homogénéisation représente la somme des contributions de chaque sous-problèmes.

Il existe des dizaines de schémas d'homogénéisation différents basés sur des analyses théoriques variées, et utilisés avec succès pour décrire le comportement de divers matériaux sous chargements complexes. Les temps de calcul ayant été fortement réduits grâce aux capacités des ordinateurs actuels, l'homogénéisation numérique est aujourd'hui facilement accessible. Néanmoins, les schémas analytiques présentent toujours un intérêt majeur même dans ce cas. Par exemple, une transition d'échelle peut être réalisée lors d'un calcul éléments finis sur microstructure pour prendre en compte les rôles d'inclusions ou de lamelles dans les grains [Roters et al., 2010].

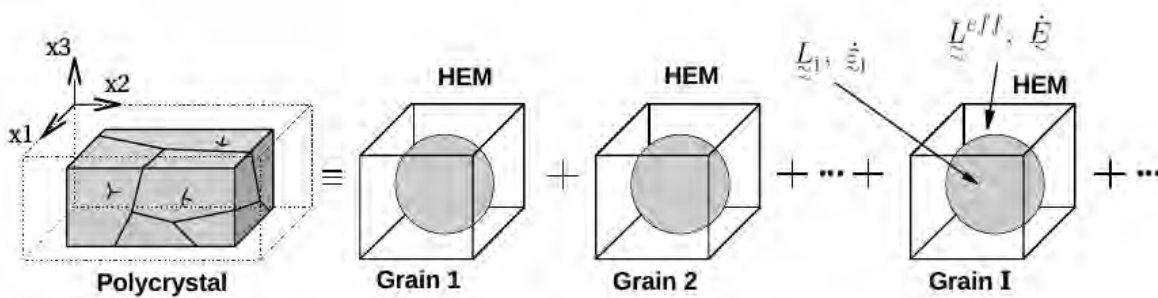


FIGURE 1.28 – Schéma présentant le principe d'un schéma auto-cohérent issu de [Martin, 2012].

### 1.3.2 Applications aux alliages TiAl

Dans cette section, on cherche à déterminer l'état actuel de la recherche en termes de modélisation du comportement mécanique des alliages TiAl par calcul sur microstructure.

#### 1.3.2.1 Microstructure presque- $\gamma$

Le comportement d'une microstructure presque- $\gamma$  a été modélisé par [Marketz et al., 2003], qui ont utilisé un modèle de plasticité cristalline phénoménologique distinguant la déformation plastique causée par le glissement de dislocation et par maclage. La courbe contrainte-déformation expérimentale est globalement reproduite par homogénéisation numérique.

D'autres travaux consacrés à la modélisation de ce type de microstructure ont été réalisés mais sur des thématiques qui sortent du cadre de ce manuscrit. Par exemple, [Bieler et al., 2009] et [Geoffroy, 2013] ont modélisé la propagation de fissures longues en traction, tandis que [Héripéré, 2006] a proposé de façon purement numérique une méthode pour l'optimisation des paramètres du modèle de plasticité cristalline.

Ainsi, les études réalisées sur les microstructures presque- $\gamma$  n'ont pas permis de discuter réellement de la déformation de ce type de microstructure. Des simulations additionnelles restent nécessaires afin de déterminer les rôles des phases  $\alpha_2$  et  $\beta_0$  sur la déformation.

### 1.3.2.2 Microstructures lamellaires

Les microstructures lamellaires sont celles d'intérêt pour les applications industrielles des alliages TiAl grâce à leur excellente tenue au fluage. C'est donc ce type de microstructure qui a concentré l'effort de diverses équipes depuis les années 1990. Un historique de l'avancée des études est proposé dans [Appel et al., 2016]. La plupart des travaux se sont d'abord concentrés sur la modélisation du comportement des cristaux PST (monocolonies lamellaires) [Kad et al., 1995, Parteder et al., 1995, Schlo et al., 1996].

Le passage au cas du polycristal est compliqué car il n'est pas envisageable de discrétiser explicitement la structure lamellaire (plusieurs centaines de lamelles par colonie) dans un maillage éléments finis contenant plusieurs centaines de colonies. Des méthodes multi-échelles ont donc été employées pour permettre l'évaluation de la plasticité à l'échelle des lamelles lors de la réalisation de calculs sur polycristaux. Les approches employées peuvent être classées en trois catégories, associées au niveau de fidélité de la description de la structure lamellaire.

Le niveau 1 consiste à utiliser la méthode des éléments finis imbriqués [Feyel, 1999, Kabir et al., 2010]. En chaque élément du maillage d'un polycristal, un sous-problème mécanique est résolu sur une cellule unitaire représentant la structure lamellaire. Un schéma est présenté en Figure 1.29. Cette méthode permet une description fidèle de la structure lamellaire, mais entraîne une augmentation significative du temps de calcul. Néanmoins, l'approche a pu être utilisée pour étudier la déformation des microstructures lamellaires [Kabir et al., 2010, Corneec et al., 2015, Kabir and Corneec, 2019].

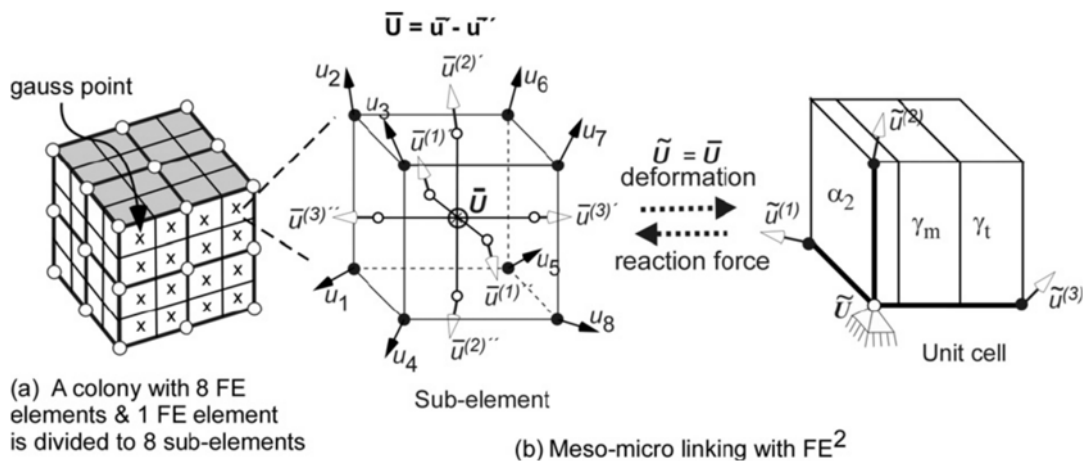


FIGURE 1.29 – Schéma issu de [Kabir et al., 2010] représentant le fonctionnement de la méthode des éléments finis imbriqués.

Le niveau 2 de description consiste à utiliser une règle de transition d'échelle analytique type champs moyens afin d'évaluer la plasticité à l'échelle des lamelles sans les décrire explicitement. Différents schémas d'homogénéisation ont été proposés dans la littérature [Roos et al., 2004, Lebensohn et al., 1998, Lebensohn, 1999, Kowalczyk-Gajewska, 2011], dont certains étaient initialement développés pour les composites stratifiés. Si les différents auteurs ont prouvé l'intérêt de cette stratégie, les différents modèles n'ont au final pas été utilisés pour étudier la déformation des alliages TiAl et répondre à une problématique matériau.

Le niveau 3 de description, le moins élevé, consiste à considérer la structure lamellaire directement au travers du modèle de plasticité cristalline : la plasticité n'est pas réellement évaluée à l'échelle des lamelles. L'idée est de sélectionner un certain nombre de systèmes de glissement dans les différents variants des lamelles  $\gamma$  et  $\alpha_2$  pour représenter globalement la déformation des colonies lamellaires [Kad et al., 1995, Grujicic and Batchu, 2001, Brockman, 2003]. Par exemple,

parmi les 108 systèmes disponibles au total dans l'ensemble des lamelles composant la structure, [Zambaldi et al., 2011] en ont retenu 18 qui suffisent à représenter l'anisotropie plastique globale des colonies lamellaires. Le passage au calcul 3D est immédiat car les performances sont celles du modèle de plasticité cristalline utilisé, qui est indépendant des systèmes considérés. Si cette approche est régulièrement employée, les résultats obtenus n'ont pas été comparés à ceux obtenus avec des niveaux de description plus élevés. On suppose que la perte d'informations pourrait modifier la prévision des premiers seuils de plasticité dans le domaine des petites déformations.

Il semble à nos yeux que le niveau de description intermédiaire basé sur l'emploi d'une transition d'échelle analytique présente un compromis intéressant entre la description de l'activité plastique et le temps de calcul.

Les différentes études numériques réalisées grâce aux approches décrites ci-dessus ont permis de révéler l'hétérogénéité de la déformation dans les microstructures lamellaires avant que celle-ci ne soit mise en évidence expérimentalement. Par exemple, [Brockman, 2003] avait observé avec son modèle qu'à 0,2 % de déformation macroscopique, une grande partie des colonies lamellaires n'étaient pas plastiquement déformées, ce qui a été confirmé expérimentalement *a posteriori* par [Edwards et al., 2019b].

Enfin, quelque soit l'approche, la modélisation du comportement mécanique des microstructures lamellaires des TiAl reste à ce jour limitée au cas de chargements monotones (traction ou compression) à température ambiante.

### 1.3.2.3 Microstructures duplex

Le comportement en traction d'une microstructure duplex a été modélisé par [Kabir et al., 2010] en combinant la modélisation du comportement des grains  $\gamma$  globulaires et des colonies lamellaires. Ils ont notamment observé que la présence de groupes ou grappes de grains  $\gamma$  augmente localement le niveau de contrainte.

### 1.3.2.4 Brève comparaison avec d'autres familles de matériaux

Il est intéressant de comparer l'état actuel de la modélisation du comportement des alliages TiAl par calcul sur microstructure aux avancées réalisées sur d'autres familles de matériaux.

Les comportements mécaniques en traction et sous sollicitations cycliques de nombreux matériaux ont été modélisés avec succès dans des gammes de température variées comme par exemple pour l'acier 316L [Guilhem et al., 2013] ou l'Inconel 718 [Cruzado et al., 2017].

Le cas des alliages de titane ( $\alpha + \beta$ ) est intéressant à mettre au regard des alliages TiAl car ces matériaux ont aussi une microstructure lamellaire. Leur comportement cyclique a d'ailleurs été modélisé avec succès en s'inspirant des travaux de [Brockman, 2003] sur les alliages TiAl [Zhang et al., 2007, Mayeur and McDowell, 2007, Bridier et al., 2009].

Le niveau de maturité des modélisations du comportement des alliages TiAl est donc bien moins avancé que celui d'autres familles de matériaux présentant des microstructures complexes.

## 1.4 Approches multi-échelles pour l'étude de la tenue en fatigue

Dans cette section, différentes méthodes permettant d'établir un lien entre la microstructure d'un matériau et ses propriétés en fatigue sont étudiées. Des généralités sur les méthodes de prévision de durée de vie en fatigue sont d'abord présentées.

## 1.4.1 Généralités sur la modélisation de la fatigue

### 1.4.1.1 Principe général

Dans le processus d'endommagement par fatigue, on distingue les contributions de la phase d'amorçage de fissure  $N_a$  et de la phase de propagation de fissure  $N_p$  sur la durée de vie finale  $N_f$  :

$$N_f = N_a + N_p \quad (1.2)$$

La contribution de ces séquences sur la durée de vie totale dépend du chargement étudié. Pour des chargements sévères entraînant des durées de vie entre  $10$ - $10^3$  cycles, la part de propagation de fissures longues est dominante. Pour des chargements entraînant des durées de vie entre  $10^3$ - $10^6$  cycles, c'est la phase d'amorçage qui pilote la durée de vie. On s'intéresse dans notre travail au deuxième cas, celui qui dépend le plus fortement de la microstructure [Chan and Kim, 1992], et donc aux critères où :

$$N_f \approx N_a \quad (1.3)$$

De même, on ne s'intéresse pas ici aux couplages avec le fluage ou l'oxydation.

Le principe général de la modélisation de la durée de vie en fatigue est de définir un critère  $C_{fatigue}$  dépendant de l'état du matériau (contrainte, déformation, variables internes de la loi de comportement...), puis de l'associer à une durée de vie. La chaîne couramment suivie est résumée en Figure 1.30. Il existe plusieurs approches et types de modèles pour prédire la durée de vie en fatigue à amorçage de fissure :

- les modèles qui s'expriment en cycles avec une formulation empirique où la contrainte et/ou la déformation et/ou l'énergie sont reliées aux nombres de cycles à amorçage ;
- l'approche couplée où une variable d'endommagement est associée à une loi d'évolution en fonction du nombre de cycles ;
- les modèles incrémentaux où l'évolution de la variable d'endommagement dépend du temps et non plus du nombre de cycles.

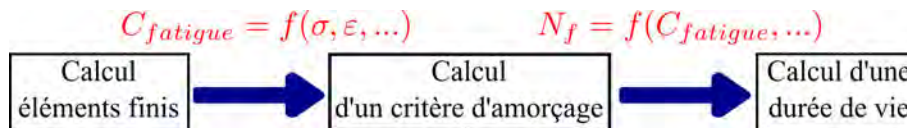


FIGURE 1.30 – Méthodologie de calcul classique pour la prévision de la durée de vie en fatigue.

$C_{fatigue}$ ,  $\sigma$ ,  $\varepsilon$  et  $N_f$  correspondent respectivement à un critère de fatigue, la contrainte, la déformation, et la durée de vie finale.

### 1.4.1.2 Exemples de modèles macroscopiques

On se limite dans notre étude aux modèles qui s'expriment en cycles. Les critères peuvent être classés en trois grandes catégories : les critères basés sur l'amplitude de déformation, les critères basés sur l'amplitude de contrainte et ceux mixtes basés sur l'énergie de déformation (produit de la contrainte et de la déformation) dissipée à chaque cycle. Par exemple, dans le critère de Manson-Coffin-Basquin, la durée de vie est calculée à partir de la mesure des déformations du matériau [Muralidharan and Manson, 1988]. La déformation totale  $\varepsilon$  est décomposée en une déformation élastique et une déformation plastique, respectivement  $\varepsilon^e$  et  $\varepsilon^p$  tel que  $\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p$ , puis reliée au nombre de cycles à rupture  $N_f$  par les relations :

$$\Delta\varepsilon^e/2 = BN_f^{-\beta} \quad \Delta\varepsilon^p/2 = AN_f^{-\alpha} \quad (1.4)$$

avec  $B$ ,  $\beta$ ,  $A$  et  $\alpha$  des paramètres matériaux à identifier à partir de résultats expérimentaux. L'identification consiste à déterminer dans un diagramme log-log la droite passant au mieux par les points expérimentaux reliant le logarithme de la durée de vie au logarithme de la déformation élastique ou plastique.

Dans le cas des alliages TiAl, ce modèle a été utilisé par [Park et al., 2002, Kruml and Obrtlík, 2014]. [Gloanec et al., 2010] et [Roth and Biermann, 2008] ont préféré utiliser des modèles énergétiques qui tiennent compte de la contribution de la contrainte et de la déformation, comme par exemple celui de Smith Watson Topper [Smith et al., 1970]. Ce modèle relie la durée de vie à un paramètre  $P_{SWT}$  défini par :

$$P_{SWT} = \sqrt{E\sigma_{max}\Delta\varepsilon/2} \quad (1.5)$$

avec  $E$  et  $\sigma_{max}$  respectivement le module d'Young et la contrainte maximale au cours d'un cycle.

Une fois les paramètres matériaux de ces critères identifiés, ceux-ci peuvent être utilisés pour le dimensionnement de structure : un calcul éléments finis est réalisé en appliquant un chargement cyclique sur une pièce ou une structure donnée afin d'obtenir l'état contrainte/déformation de celle-ci. Sur la base de cet état mécanique numérique, le critère est alors appliqué sur un cycle spécifique, assimilé comme étant le cycle stabilisé, afin d'estimer une durée de vie (Figure 1.30).

Les modèles présentés précédemment considèrent un chargement uniaxial. Or en réalité, l'état de contrainte/déformation obtenu par calcul et vu par les pièces d'intérêt est la plupart du temps multiaxial ce qui influe drastiquement sur la durée de vie estimée [Socie and Marquis, 2000]. Pour en tenir compte, des critères multi-axiaux ont été proposés. Leur identification demande la réalisation d'expériences nécessitant d'imposer un chargement à minima biaxial (traction/traction, traction/torsion ou traction/pression interne). Là encore, les modèles peuvent être classés en différentes catégories : les modèles empiriques en contrainte/déformation comme le Manson-Coffin étendu, les modèles énergétiques et les modèles de type plan critique [Kruch et al., 2015].

Ces derniers sont intéressants pour effectuer un lien avec la microstructure, car ils partent d'observations réalisées à l'échelle locale qui postulent que les fissures s'amorcent dans un plan cristallographique critique. Par exemple, [Fatemi and Socie, 1988] ont proposé le critère de Fatemi-Socie  $P_{FS}$  qui consiste à déterminer le plan contenant l'amplitude de cisaillement maximale au cours d'un cycle  $\Delta\gamma_{max}$ , puis de déterminer la contrainte normale maximale au cours du cycle à ce plan  $\sigma_{n,max}$  pour obtenir :

$$P_{FS} = \frac{\Delta\gamma_{max}^p}{2} \left( 1 + k \frac{\sigma_{n,max}^n}{\sigma_0} \right) \quad (1.6)$$

avec  $\sigma_0$  et  $k$  respectivement la limite d'élasticité en traction et un paramètre matériau à identifier à partir d'essais de fatigue uniaxiaux et de torsion.

Ces approches, utilisées principalement à l'échelle macroscopique ces trente dernières années [Jiang et al., 2007], ont trouvé un regain d'intérêt avec le développement des études micro-mécaniques pour traiter de la modélisation de la tenue en fatigue à l'échelle du grain, retrouvant ainsi le cadre physique originel de ces modèles [McDowell, 2007].

## 1.4.2 Étude de la tenue en fatigue à l'échelle de la microstructure

La tenue en fatigue des matériaux peut être étudiée à l'échelle de la microstructure par la réalisation de calcul sur microstructure et l'application de différents critères permettant de déterminer les sites propices d'amorçage de microfissures [McDowell and Dunne, 2010]. Les travaux discutés ci-dessous partent du postulat que le comportement mécanique cyclique du matériau est modélisé par calcul sur microstructure et homogénéisation numérique. On s'intéresse aux



méthodologies permettant d'identifier les zones critiques d'amorçage de microfissures, de comparer les performances entre différentes microstructures et d'établir un lien avec une durée de vie expérimentale.

### 1.4.2.1 Analyse aux valeurs extrêmes d'indicateurs de tenue en fatigue

Contrairement aux approches macroscopiques non probabilistes qui permettent de déterminer une résistance en fatigue moyenne, l'étude de la tenue en fatigue à l'échelle de la microstructure permet d'intégrer une variabilité associée à ladite microstructure [McDowell, 2007]. L'objectif est d'étudier différents arrangements locaux statistiquement représentatifs d'une même microstructure afin de déterminer la configuration critique de celle-ci, et d'y rechercher les sites propices d'amorçage.

[Przybyla and McDowell, 2010] ont ainsi proposé une méthodologie de calcul basée sur une analyse aux valeurs extrêmes d'Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF, traduction de "fatigue indicator parameter") et l'ont appliqué à l'Inconel 100, un superalliage base nickel. Le principe est détaillé dans le schéma présenté en Figure 1.31.

Pour une microstructure d'intérêt  $A$ ,  $N$  arrangements statistiquement représentatifs sont générés. Chaque arrangement est sollicité cycliquement à  $K$  demi-amplitudes de déformation. Pour chaque calcul, l'état local contrainte-déformation est utilisé pour calculer un Indicateur de Tenue en Fatigue (ITF)  $P$ , et la valeur extrême de cet ITF est extraite. Pour un arrangement  $i$ , on a donc  $K$  valeurs extrêmes, et pour une microstructure  $A$ ,  $N \times K$  valeurs extrêmes. L'étude de la distribution des valeurs extrêmes d'indicateurs permet alors de déterminer les causes d'amorçage de fissure dans la microstructure. Dans [Przybyla and McDowell, 2010], les auteurs montrent par exemple que les clusters de grains orientés pour le glissement cubique constituent les zones les plus critiques pour l'amorçage de fissure.

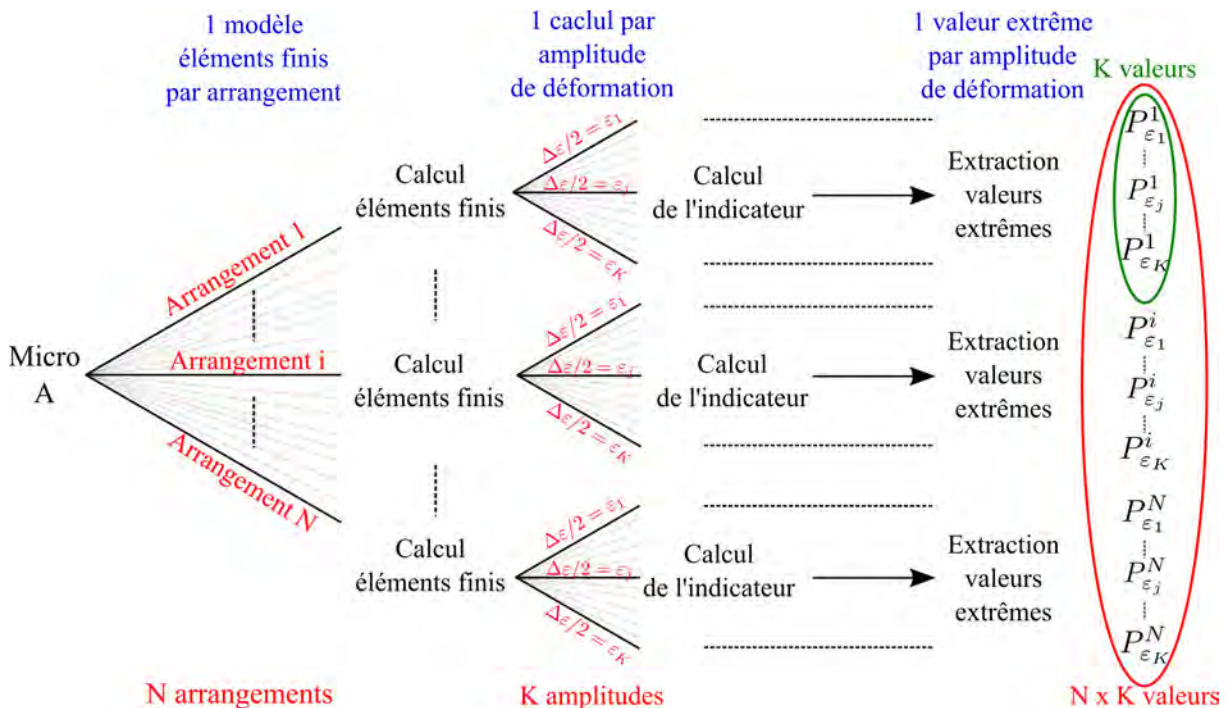


FIGURE 1.31 – Méthodologie de calcul proposée par [Przybyla and McDowell, 2010] pour réaliser une analyse aux valeurs extrêmes. Les explications sont données dans le texte.

Dans une seconde étude, [Przybyla and McDowell, 2011] ont repris la stratégie de calcul en

l'appliquant cette fois-ci à l'alliage de titane TA6V à microstructure duplex, l'idée étant ici de faire varier de façon purement numérique les proportions de phase dans la microstructure pour prédire l'impact de cette caractéristique microstructurale sur la tenue en fatigue. Un lien direct est ainsi établi entre les proportions de phase, l'orientation des grains et la tenue en fatigue. La même méthodologie a été reprise par [Smith et al., 2016] et a permis de déterminer différents sites d'amorçage privilégié sur d'autres alliages de titane.

Ce type d'approche permet aussi d'étudier l'impact de défauts sur la tenue en fatigue. Par exemple, [Prithivirajan and Sangid, 2018] ont estimé numériquement la fraction volumique et la taille critiques de pores pour de l'Inconel 718 issu de fabrication additive. Dans un autre registre, [Bandyopadhyay and Sangid, 2019] ont réalisé une analyse d'ITF sur un superalliage base nickel afin d'étudier la compétition entre l'amorçage de fissure de fatigue autour d'inclusions et dans la matrice.

Enfin, la méthode semble parfaitement adaptée à l'étude de nouveaux concepts d'alliage ou de microstructure de façon purement numérique.

#### 1.4.2.2 Exemples d'indicateurs de tenue en fatigue et des problématiques associées

L'utilisation de différents indicateurs permet de rechercher différents types de zones critiques. Des exemples sont présentés en Figure 1.32. Par exemple, l'indicateur  $P_{jg}$  (adaptation de l'ITF de Fatemi-Socie) permet de mesurer la tendance à amorcer une fissure intergranulaire liée à des incompatibilités de déformation entre deux grains voisins. Avec  $\gamma_{net}^p$  la plasticité accumulée maximale dans une direction et  $\sigma_{jg}^n$  la contrainte normale maximale au joint de grain,  $P_{jg}$  s'écrit :

$$P_{jg} = \gamma_{net}^p \left( 1 + k_p \frac{\sigma_{jg}^n}{\sigma_0} \right) \quad (1.7)$$

L'ITF de Fatemi-Socie peut aussi être adapté au cas des colonies lamellaires pour mesurer la tendance à ouvrir une fissure sur le plan d'interface lamellaire. Soit  $\Delta\gamma_{lam}^p/2$  le cisaillement plastique maximal au cours d'un cycle sur le plan d'interface lamellaire et  $\sigma_{lam}^n$  la contrainte normale à ce plan maximale au cours du même cycle, l'ITF  $P_{lam}$  s'écrit :

$$P_{lam} = \frac{\Delta\gamma_{lam}^p}{2} \left( 1 + k_l \frac{\sigma_{lam}^n}{\sigma_0} \right) \quad (1.8)$$

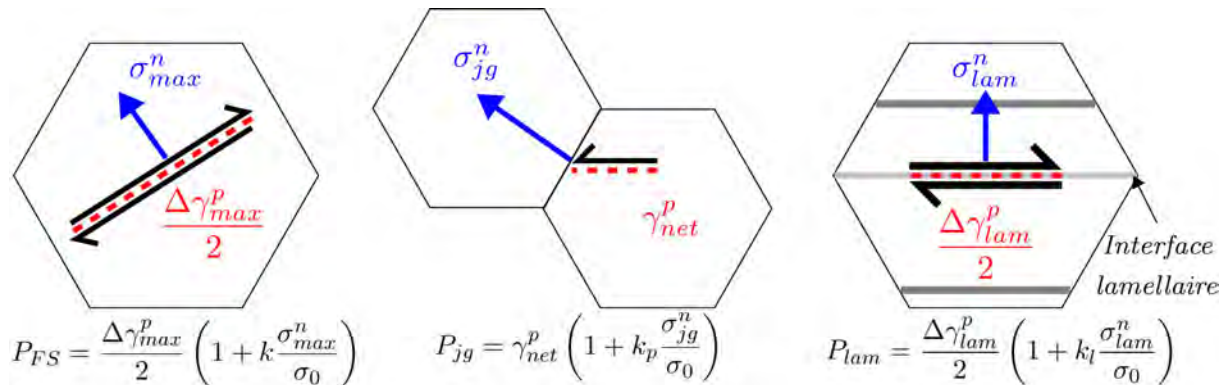


FIGURE 1.32 – Schéma de différents indicateurs de fatigue ("fatigue indicator parameter") empiriques proposés dans la littérature.

Les indicateurs présentés jusqu'à présent sont de type plan critique, plutôt dépendants de la déformation plastique. Cependant, de nombreux critères ont été testés comme ITF.

On retrouve par exemple l'utilisation de grandeurs qui dépendent de la contrainte et de la déformation (sans notion de plan critique), comme l'énergie dissipée au cours d'un cycle [Korsunsky et al., 2007] ou la plasticité cumulée [Guilhem et al., 2010]. [Korsunsky et al., 2007] écrivent ainsi l'énergie dissipée comme une somme de l'énergie dissipée sur les systèmes de glissement  $s$  disponibles :

$$W_{cyc} = \sum_s \int_{cycle} \tau^s \dot{\gamma}^s dt \quad (1.9)$$

C'est néanmoins la notion de plan critique qui est le plus souvent employée car elle ressort naturellement des modèles de plasticité cristalline dans lesquelles une cission critique et une plasticité cumulée sont calculées sur différents plans et systèmes de glissement. Par exemple, [Cruzado et al., 2018] utilisent aussi l'énergie dissipée au cours d'un cycle, mais cette fois à l'échelle des systèmes de glissement  $s$  :

$$W_{cyc}^s = \int_{cycle} \tau^s \dot{\gamma}^s dt \quad (1.10)$$

avec  $\tau^s$  et  $\dot{\gamma}^s$  respectivement la cission critique et le taux de cisaillement plastique du système de glissement  $s$ .

[Guilhem et al., 2010, Hor et al., 2014] ont eux utilisé plusieurs critères en contrainte proposés initialement à l'échelle macroscopique pour la fatigue à grand nombre de cycles (Dang Van, Matake, Crossland) comme ITF, et montrent que les résultats obtenus quelque soit le critère sont globalement cohérents.

On note aussi que l'utilisation de modèles de plasticité cristalline à base physique permet de proposer des ITF utilisant la notion de densité de dislocation, comme par exemple la densité d'énergie stockée au cours d'un cycle [Chen et al., 2018].

Enfin, [Guilhem et al., 2013] ont proposé un ITF permettant d'estimer la hauteur des marches causées par le phénomène d'intrusion-extrusion en surface,  $P_{ex}$ , tel que pour les systèmes de glissement  $s$  appartenant au plan  $pl$  :

$$P_{ex}^{pl} = \left( \sum_{s \in pl} \gamma^s \underline{l}^s \right) \cdot \underline{n}_{surf} \quad (1.11)$$

avec  $\underline{l}^s$  la direction de glissement du système  $s$  et  $\underline{n}_{surf}$  la normale à la surface.

Face à ce champ de possibilité, la question de pose de savoir s'il existe un indicateur de référence. [Prithivirajan and Sangid, 2020] ont comparé numériquement six ITF de différents types (plan critique, énergétique, empirique) et montrent que les zones critiques et tendances obtenues sont similaires. Des comparaisons directes avec des résultats expérimentaux montrent que tous les indicateurs identifient correctement les zones où des amorçages de microfissures ont été observés [Basseville et al., 2017, Chen et al., 2018].

En réalité, les résultats obtenus semblent dépendre plus des conditions de réalisations du calcul (maillage, conditions aux limites, nombre de grains considéré) [Prithivirajan and Sangid, 2020]. En effet, les calculs sont la plupart du temps réalisés sur des maillages réguliers (cubiques) contenant peu d'éléments par grains principalement pour deux raisons :

- les modèles de plasticité cristalline sont coûteux en temps de calcul et en stockage de données ;
- de nombreux calculs doivent être réalisés pour chaque microstructure étudiée comme montré Figure 1.31, il est donc nécessaire de limiter le temps de calcul et la quantité de données générées.

Pour parer à ce problème, la plupart des auteurs travaillent avec des ITF non-locaux, c'est-à-dire moyennés sur une région donnée. Ainsi, c'est souvent une moyenne par grain qui est réalisée :

les ITF sont calculés sur tout le maillage, puis moyenné grain par grain (1 calcul avec 150 grains = 150 ITF à la fin). Il a été montré que travailler avec des grandeurs moyennées par grain donne en effet des résultats satisfaisants même si l'on perd une partie de la localisation de la déformation [Prithivirajan and Sangid, 2020]. [Castelluccio and McDowell, 2015] ont proposé une alternative qui permet de conserver les propriétés de localisation : travailler sur des grandeurs moyennées par plan de glissement. Cela nécessite cependant des traitements complexes qui contiennent un certain nombre d'approximations géométriques.

Ces différences de méthodologie signifient que les valeurs des ITF obtenues ne sont pas absolues et pas quantitatives. C'est-à-dire que les ITF calculés dans une étude A avec une méthode A ne peuvent être directement comparés avec ceux d'une étude B avec une méthode B. Les résultats peuvent donc être vus comme qualitatifs en l'état actuel.

### 1.4.2.3 Lien avec une durée de vie

Les méthodes présentées sont adaptées à la réalisation d'études purement numériques des causes d'amorçage de fissure de fatigue dans la microstructure. Néanmoins, il est aussi possible de réaliser un lien direct avec une durée de vie expérimentale. La durée de vie à amorçage  $N_a$  se décompose en deux nouvelles phases [McDowell and Dunne, 2010] :

$$N_f = N_a + N_p = N_{inc} + N_{mf} + N_{prop} \quad (1.12)$$

avec  $N_{inc}$  et  $N_{mf}$  respectivement les phases d'incubation et de propagation de microfissures (de l'ordre de la taille des grains), qui après coalescence forment une fissure longue ( $\sim 1$  mm).

[Shenoy et al., 2007] ont fait une analogie entre l'ITF de Fatemi-Socie et le modèle de durée de vie à amorçage de Tanaka-Mura ([Tanaka and Mura, 1981]). Dans ce modèle, pour un chargement uniaxial,  $N_{inc}$  est relié à l'amplitude de déformation plastique  $\Delta\varepsilon^p$  par :

$$N_{inc} (\Delta\varepsilon^p)^2 = \frac{\alpha_p}{d_{gr}} \quad (1.13)$$

avec  $\alpha_p$  un paramètre à identifier et  $d_{gr}$  la taille du grain. Dans le cas d'un chargement uniaxial, le cisaillement plastique maximal macroscopique au cours d'un cycle est proportionnel à l'amplitude de déformation plastique tel que :

$$\left( \frac{\Delta\gamma_{max}^p}{2} \right)_{macro} = \frac{3}{2} \left( \frac{\Delta\varepsilon^p}{2} \right) \quad (1.14)$$

alors :

$$N_{inc} \left( \frac{\Delta\gamma_{max}^p}{2} \right)_{moyen}^2 = \frac{\alpha_g}{d_{gr}} \quad (1.15)$$

avec  $\alpha_g$  qui reprend le facteur  $\alpha_p$  avec une transition d'échelle associée à la réalisation d'une moyenne du cisaillement plastique maximal sur un grain  $(\Delta\gamma_{max}^p/2)_{moyen}$ .

[Castelluccio et al., 2016, Yuan et al., 2018, Clark et al., 2019] proposent de faire intervenir directement les valeurs extrêmes d'ITF de Fatemi-Socie tel que :

$$N_{inc} = \frac{\alpha_g}{d_{gr}} P_{FS}^{-2} \quad (1.16)$$

avec  $\alpha_g$  un paramètre matériau à identifier. Une dispersion de la durée de vie à incubation est obtenue grâce à l'étude de différents arrangements statistiquement représentatifs d'une même microstructure.

[Manonukul and Dunne, 2004] ont eux proposé une approche basée sur la plasticité cumulée critique  $p_{crit}$ . Il s'agit de la valeur de plasticité cumulée à atteindre pour amorcer une fissure de fatigue. En supposant  $N_a > N_{prop}$ , on peut dire qu'au nombre de cycles à rupture  $N_f$ , la plasticité cumulée  $p \approx p_{crit}$ . Lorsque le cycle stabilisé est atteint, on peut alors calculer la plasticité accumulée par cycle  $p_{cyc}$ , et la relier à la durée de vie :

$$N_f \approx N_a = \frac{p_{crit}}{p_{cyc}} \quad (1.17)$$

Ces grandeurs locales peuvent ensuite être introduites dans des modèles macroscopiques type Manson-Coffin-Basquin.

Cette approche a été reprise avec succès par [Sweeney et al., 2012] et [Cruzado et al., 2018]. Dans le dernier cas, les auteurs ont remplacé  $p_{crit}$  et  $p_{cyc}$  respectivement par l'énergie dissipée  $W_{crit}$  et  $W_{cyc}$  et ont rajouté une non-linéarité portée par une loi puissance telle que :

$$N_f \approx N_a = \frac{W_{crit}}{(W_{cyc})^m} \quad (1.18)$$

avec  $m$  un paramètre à identifier ce qui permet d'obtenir une relation de Manson-Coffin-Basquin bilinéaire pour tenir compte des écarts de durée de vie entre les fortes et faibles amplitudes de déformation.

## 1.5 Résumé des points clés & et de la démarche adoptée

Dans les études micromécaniques expérimentales portant sur les alliages TiAl, les auteurs identifient différentes zones des microstructures lamellaires comme potentiellement critiques pour la fatigue. Si l'analyse des travaux permet de déduire certains mécanismes d'amorçage de fissure, un lien direct n'a pas été clairement établi entre les caractéristiques microstructurales de ces matériaux et la tenue en fatigue. Ce constat est d'autant plus vrai dans le cas des microstructures génériques contenant des grains  $\gamma$  qui ont fait l'objet de relativement peu d'études. Enfin, certains auteurs font état d'une très forte dépendance de la durée de vie à l'amplitude de déformation appliquée : une légère modification peut entraîner le passage d'un régime à grand nombre de cycles vers un régime à faible nombre de cycles. L'origine de ce phénomène est inconnue.

L'objectif de notre travail est donc d'établir un lien entre la microstructure et la tenue en fatigue des alliages TiAl. Nous souhaitons pour cela réaliser une analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF) comme proposée dans la littérature, en adaptant la méthode à notre étude. À cet effet, le comportement mécanique cyclique de toutes les microstructures que l'on souhaite considérer doit être modélisé par calcul sur microstructure et homogénéisation numérique.

La modélisation du comportement cyclique suppose de connaître celui-ci expérimentalement. C'est l'objectif du deuxième chapitre, dans lequel nous étudions les comportements des quatre microstructures génériques des alliages TiAl à 20 °C et 750 °C. Si le lien entre microstructure et comportement cyclique n'a pas été établi dans la littérature, des auteurs ont fait état d'un effet Bauschinger conséquent. Dans nos travaux, cet effet est donc mis au regard des caractéristiques microstructurales. Pour clore ce chapitre, des essais micromécaniques sont réalisés sur une microstructure presque- $\gamma$  et une microstructure totalement-lamellaire afin d'analyser les champs de déformation locaux et les mettre en regard des résultats macroscopiques. Les données expérimentales obtenues sont utilisées par la suite pour asseoir la stratégie de modélisation multi-échelles retenue.

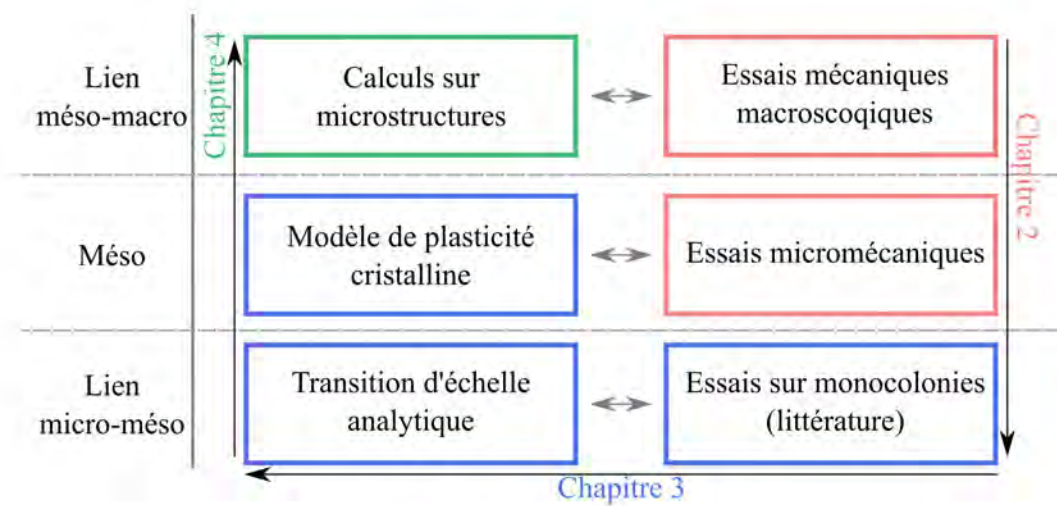
Dans le troisième chapitre, le modèle de plasticité cristalline utilisé pour la réalisation des calculs éléments finis sur microstructure est établi. Nous avons vu dans l'étude bibliographique qu'une transition d'échelle doit être utilisée afin d'évaluer la plasticité à l'échelle des lamelles. Nous proposons d'utiliser le niveau de description qualifié d'intermédiaire, basé sur une transition d'échelle analytique, qui n'a pas été vraiment utilisé pour étudier le comportement jusqu'à présent. Cette approche présente à nos yeux un compromis intéressant entre la représentation des phénomènes physiques et le temps de calcul. Les travaux étant à ce jour limités à la modélisation du comportement monotone, l'objectif est de proposer un modèle qui permette de modéliser le comportement cyclique à 20 °C et 750 °C. Afin de vérifier que la forte anisotropie plastique des colonies lamellaires est reproduite par le modèle, le comportement mécanique de monocolonies lamellaires est simulé. Ce travail permet de pré-identifier un certain nombre de paramètres matériaux du modèle avant de passer au cas du polycristal.

Dans le quatrième chapitre, le comportement mécanique à l'échelle du polycristal est modélisé. Des microstructures virtuelles statistiquement représentatives des microstructures étudiées sont générées. L'identification des paramètres matériaux du modèle de plasticité cristalline est réalisée par homogénéisation numérique, à partir des courbes contrainte-déformation expérimentales. Afin de vérifier que les champs mécaniques locaux prédits par le modèle sont représentatifs de champs mesurés expérimentalement, un des essais micromécaniques est simulé. Le comportement mécanique des quatre microstructures génériques est ensuite modélisé, révélant l'aspect prédictif de la stratégie employée.

Enfin, dans le cinquième et dernier chapitre, la modélisation multi-échelles du comportement mécanique est utilisée afin d'étudier la tenue en fatigue des alliages TiAl au travers d'une analyse d'indicateurs de tenue en fatigue. Les tenues en fatigue des microstructures génériques sont comparées, et les caractéristiques microstructurales pilotant l'amorçage de fissures de fatigue sont identifiées pour chacune d'entre elles. Les résultats obtenus permettent de répondre aux interrogations de la littérature soulignées ci-dessus. Un retour vers la métallurgie est ensuite réalisé en indiquant les zones à renforcer pour améliorer les propriétés en fatigue de futurs alliages. Dans une dernière section, une méthodologie permettant l'utilisation d'un modèle de fatigue écrit à l'échelle de la microstructure lors de la réalisation de calculs de dimensionnement est proposée.

L'organisation du manuscrit est schématisé en [Figure 1.33](#).

Chapitre 2, 3 et 4  
Étude et modélisation du comportement mécanique



Chapitre 5  
Étude de la tenue en fatigue

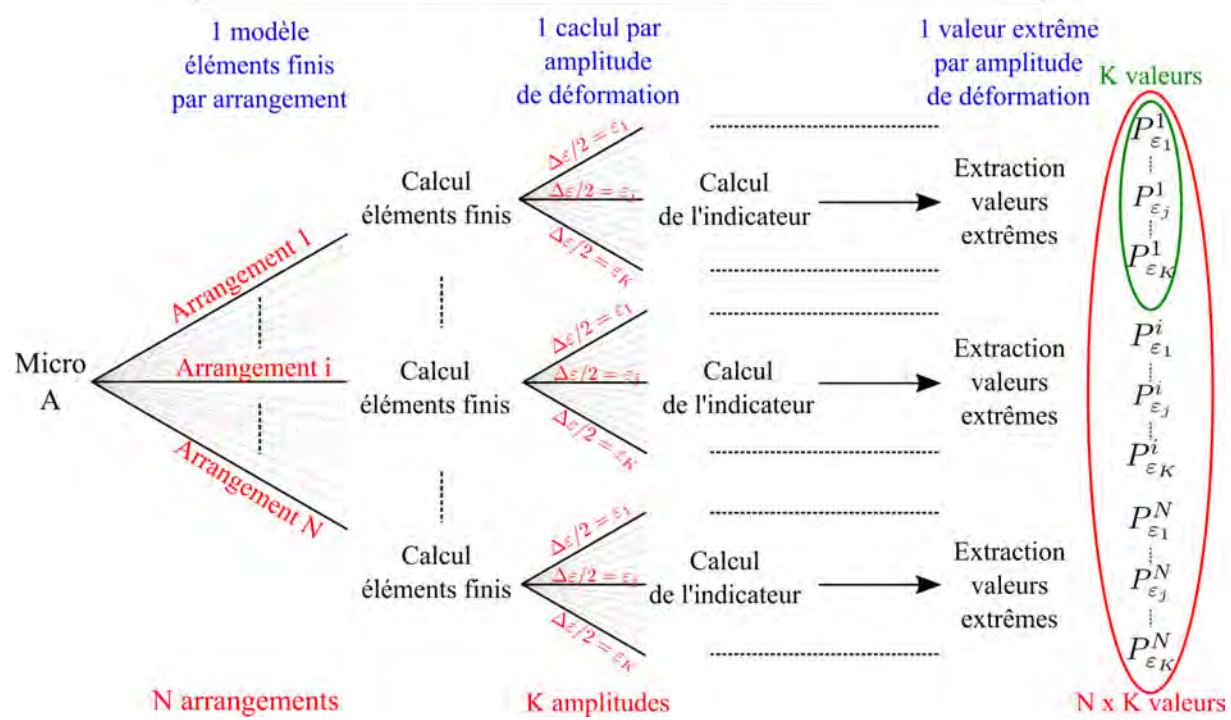


FIGURE 1.33 – Schéma représentant l’organisation du manuscrit et la progression des chapitres.

## Chapitre 2

# Étude expérimentale multi-échelles du comportement mécanique des alliages TiAl

### Résumé :

Dans ce chapitre, le comportement mécanique des alliages TiAl est étudié aux différentes échelles d'intérêt pour la chaîne de modélisation envisagée. Dans un premier temps, avec une vision macroscopique, on cherche à mettre en évidence l'impact de la microstructure sur la réponse contrainte-déformation. L'étude des quatre microstructures dites génériques des alliages TiAl permet d'isoler le rôle des différentes phases en présence. Dans un second temps, on s'intéresse au comportement à l'échelle mésoscopique en étudiant la localisation de la déformation dans deux microstructures aux comportements diamétralement opposés via la réalisation d'essais micromécaniques.

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Échelle macroscopique : étude expérimentale du comportement cyclique élasto-visco-plastique des alliages TiAl . . . . .</b>	<b>55</b>
2.1.1	Matériau et microstructures . . . . .	55
2.1.2	Matrice d'essais mécaniques . . . . .	57
2.1.3	Analyse des boucles d'hystérésis : effet Bauschinger et caractéristiques du comportement cyclique . . . . .	60
2.1.4	Résultats de la campagne d'essais . . . . .	62
2.1.4.1	Essais à 20 °C . . . . .	62
2.1.4.2	Essais à 750 °C . . . . .	65
2.1.5	Analyse des résultats et lien avec les mécanismes de déformation . . . . .	68
2.1.6	Essais de fatigue-temps de maintien à 750 °C . . . . .	70
2.1.6.1	Chargement et méthode d'analyse . . . . .	70
2.1.6.2	Résultats & discussion . . . . .	72
2.1.7	Résumé intermédiaire des principaux résultats . . . . .	73
<b>2.2</b>	<b>Échelle mésoscopique : étude de la localisation de la déformation dans les microstructures des alliages TiAl . . . . .</b>	<b>74</b>
2.2.1	Moyens d'essais et corrélation d'images . . . . .	74
2.2.1.1	Platine d'essais et éprouvettes . . . . .	74
2.2.1.2	Corrélation d'images . . . . .	74
2.2.2	Étude de la localisation de la déformation dans une microstructure presque- $\gamma$ : essai <i>in situ</i> MEB . . . . .	76



2.2.2.1	Mouchetis et conditions d'acquisition . . . . .	76
2.2.2.2	Analyse de la déformation dans les microstructures presque- $\gamma$ .	77
2.2.3	Étude de la déformation dans une microstructure totalement-lamellaire : essais sous moyens optiques . . . . .	79
2.2.3.1	Moyens d'acquisition & caractérisation du comportement mé- canique . . . . .	79
2.2.3.2	Analyse de la déformation dans les microstructures totalement- lamellaires . . . . .	82
2.2.3.3	Discussion . . . . .	87
<b>2.3</b>	<b>Résumé des résultats expérimentaux . . . . .</b>	<b>87</b>

---

## 2.1 Échelle macroscopique : étude expérimentale du comportement cyclique élasto-visco-plastique des alliages TiAl

Une première approche pour caractériser le comportement mécanique d'un matériau est l'étude de sa réponse contrainte-déformation via la réalisation d'essais mécaniques standards. Cette réponse macroscopique est une moyenne du comportement mécanique local de chaque grain présent dans la zone utile de l'éprouvette. Pour un alliage donné, on peut donc mettre en évidence le rôle des différentes phases constitutives sur le comportement mécanique macroscopique en étudiant le comportement de microstructures distinctes en termes de proportion, de taille et de morphologies des phases. C'est l'objectif de cette partie.

À partir d'un alliage de base, les quatre microstructures génériques des alliages TiAl sont obtenues par application de traitements thermiques. L'ensemble de la gamme des comportements mécaniques possibles est ainsi balayée. Des essais mécaniques macroscopiques sont alors réalisés à 20 °C et 750 °C. On s'intéresse au comportement élasto-visco-plastique en analysant différentes caractéristiques : l'entrée dans le domaine plastique, l'écroutissage, l'effet Bauschinger (qui sera défini par la suite) et la sensibilité à la vitesse de déformation. On différencie ainsi le rôle des grains  $\gamma$  globulaires de celui des colonies lamellaires sur le comportement mécanique macroscopique.

### 2.1.1 Matériau et microstructures

Le matériau utilisé pour ce travail est l'alliage G4 Ti-47Al-1Re-1W-0.2Si (at.%) développé à l'Onera au début des années 2000 et obtenu par métallurgie des poudres [Grange et al., 2004]. L'élaboration du matériau date de 2003. Les lingots ont été coulés par l'entreprise Howmet puis atomisés à l'argon chez Crucible. Une Compaction Isostatique à Chaud (CIC) a ensuite été réalisée par Bodycote à 140 MPa pendant 4h à 1250 °C. L'analyse chimique de la poudre est donnée dans le Tableau 2.1.

Ti (at. %)	Al (at. %)	Re (at. %)	W (at. %)	Si (at. %)	C (ppm)	O (ppm)
50,85	47,01	0,95	0,95	0,24	175	1240

TABLEAU 2.1 – Composition chimique de l'alliage G4 étudié.

Des ébauches ont été découpées dans les lingots par électro-érosion à l'Onera. Des traitements thermiques ont ensuite été appliqués pour obtenir les quatre microstructures génériques des alliages TiAl. Ces traitements post-CIC ont entraîné l'apparition de porosités induites par la détente de gaz. Ce gaz était d'abord piégé dans les poudres après le processus d'atomisation, puis dans les lingots après la compaction. La caractérisation de ces porosités a permis de montrer que leur taille et leur fraction surfacique dépend de la durée de traitement thermique, de la température du traitement, et de la taille des grains, ce qui est en accord avec des travaux de la littérature [Wegmann et al., 2003]. Ces porosités, bien que néfastes pour la tenue en fatigue du matériau, n'ont pas d'impact sur le comportement macroscopique tel qu'étudié ici du fait de leur faible fraction volumique [Chawla and Deng, 2005].

Les microstructures obtenues ont ensuite été caractérisées afin de quantifier les phases en présence. On propose ici une caractérisation simple où l'on vient mesurer la fraction surfacique des phases, la taille moyenne des grains et l'épaisseur moyenne des lamelles. L'idée est de pouvoir ensuite discuter facilement des différences de comportement mécanique à partir de ces grandeurs moyennes.

Pour la caractérisation microstructurale, les échantillons sont d'abord polis mécaniquement au papier abrasif (P1200, 9  $\mu\text{m}$ , 3  $\mu\text{m}$ , 1  $\mu\text{m}$ , 0,25  $\mu\text{m}$ ), puis caractérisés en microscopie élec-

tronique à balayage. Une série d'images est réalisée afin de quantifier de façon statistique les phases en présence. Quand le contraste le permet, les mesures sont réalisées par segmentation d'images en utilisant le logiciel d'analyse d'images ImageJ [Schneider et al., 2012]. Dans le cas des microstructures à forte teneur en colonies lamellaires, la taille et la fraction surfacique de celles-ci sont mesurées à la main. La taille est discutée en terme de diamètre équivalent.

L'épaisseur des lamelles dans les colonies lamellaires est mesurée en utilisant la méthodologie proposée dans [Bertheaux, 2005]. Un échantillon est coupé en deux puis poli sur les deux faces adjacentes. Les espacements lamellaires apparents des colonies situées sur ces deux faces (i.e. le coin de l'échantillon coupé) sont mesurés. Une correction stéréologique est ensuite appliquée pour remonter au véritable espacement lamellaire. Là encore, plusieurs mesures sont réalisées pour obtenir des observations statistiquement représentatives. L'épaisseur des lamelles dépend de la vitesse de refroidissement. Celle-ci n'est donc mesurée qu'une fois pour chaque condition de refroidissement.

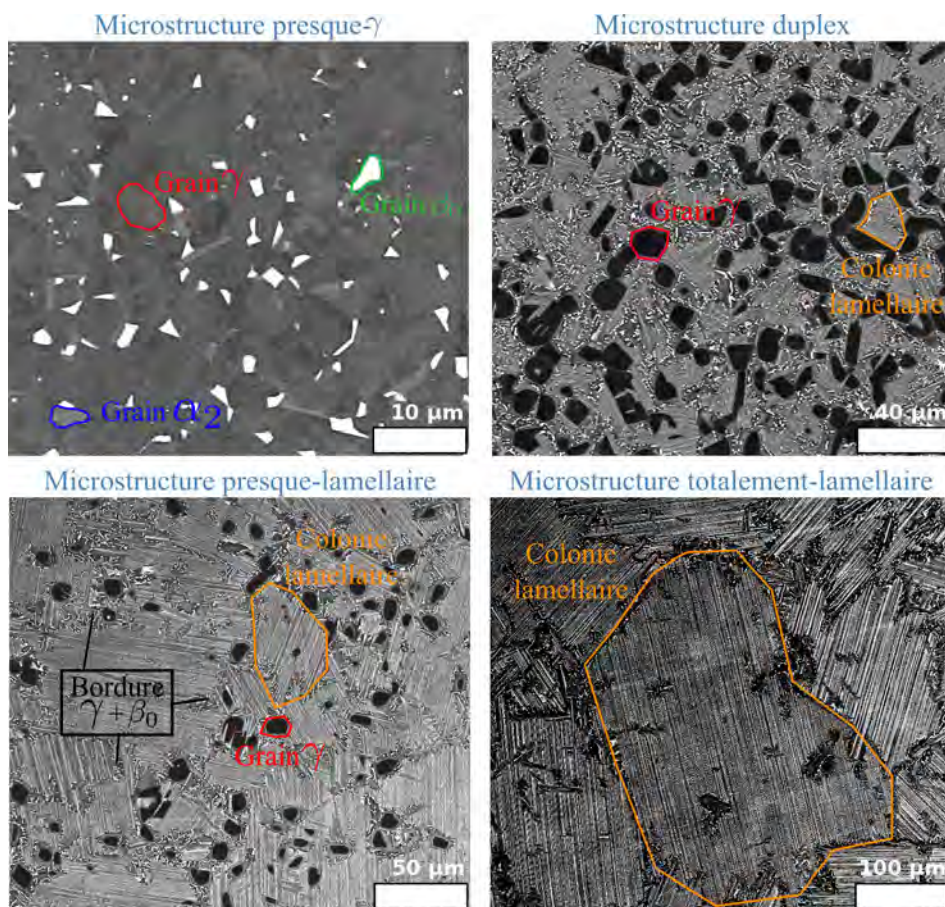


FIGURE 2.1 – Micrographies en électrons rétrodiffusés des quatre microstructures génériques des alliages TiAl obtenues pour l’alliage G4. Pour la microstructure presque- $\gamma$ , le contraste le plus sombre (entouré en rouge) correspond à la phase  $\gamma$ , le contraste grisâtre (entouré en bleu) correspond à la phase  $\alpha_2$  et le contraste blanc à la phase  $\beta_0$ . Sur les autres images, les grains globulaires sombres sont des grains  $\gamma$ , tandis que ceux hachurés sont des colonies lamellaires (alternance de contraste gris-sombre pour lamelles  $\alpha_2$ - $\gamma$ ). Les bordures de phase  $\gamma$  contenant des précipités  $\beta_0$  entourent les grains et les colonies (zones grisâtre avec multiples points blancs).

Il est important de préciser que réaliser des caractérisations microstructurales précises des microstructures des alliages TiAl est délicat même par EBSD du fait de la taille des lamelles

et de la pseudo-symétrie de la phase  $\gamma$  (voir chapitre 1). Dans le cadre de notre étude, réaliser des mesures à la main, bien que cela soit fastidieux, a présenté le meilleur ratio données générées/temps de manipulation.

Des micrographies des microstructures obtenues sont présentées en Figure 2.1. Les résultats de la caractérisation sont donnés dans le Tableau 2.2.

La microstructure post-CIC est la microstructure presque- $\gamma$ . Elle contient majoritairement des grains globulaires  $\gamma$  équiaxes d'une taille moyenne de 5  $\mu\text{m}$ . Des grains de phase  $\beta_0$  ( $\sim 2,5\%$ ) et  $\alpha_2$  ( $\sim 2,5\%$ ) sont présents.

La microstructure duplex est obtenue après un traitement thermique de 4h à 1340 °C suivi d'un refroidissement à l'air. Elle contient des grains globulaires équiaxes  $\gamma$  ( $\sim 8\ \mu\text{m}$ ) et des colonies lamellaires ( $\sim 15\ \mu\text{m}$ ) dans des proportions équivalentes. Ces grains et colonies sont entourés d'une bordure de phase  $\gamma$  contenant des précipités  $\beta_0$  comme observé dans l'alliage IRIS [Voisin et al., 2016a].

La microstructure presque-lamellaire est obtenue après un traitement thermique de 1h à 1360 °C suivi d'un refroidissement à l'air. Cette microstructure contient majoritairement des colonies lamellaires ( $\sim 90\%$ ,  $\sim 50\ \mu\text{m}$ ) mais des grains  $\gamma$  sont toujours présents ( $\sim 10\%$ ,  $\sim 8\ \mu\text{m}$ ). Une bordure entoure toujours les colonies et grains.

La microstructure totalement-lamellaire est obtenue après un traitement thermique d'une heure à 1360 °C suivi d'un refroidissement au four. Cette microstructure est composée de grandes colonies lamellaires ( $\sim 200\ \mu\text{m}$ ) encore une fois entourées d'une bordure de phase  $\gamma$ .

	$\gamma$		$\alpha_2$		$\beta_0$		Lamellaire		
	FS (%)	TG ( $\mu\text{m}$ )	FS (%)	TG ( $\mu\text{m}$ )	FS (%)	TG ( $\mu\text{m}$ )	FS (%)	TG ( $\mu\text{m}$ )	TL ( $\mu\text{m}$ )
Presque- $\gamma$	95	5	2,5	2	2,5	2	-	-	-
Duplex	50	8	-	-	-	-	50	15	0,08
Presque-lamellaire	10	8	-	-	-	-	90	50	0,08
Totalement-Lamellaire	-	-	-	-	-	-	100	200	0,3

TABLEAU 2.2 – Résultats de la caractérisation microstructurale. Les abréviations FS, TG et TL signifient respectivement Fraction Surfactive, Taille des Grains et Taille des Lamelles.

### 2.1.2 Matrice d'essais mécaniques

Le comportement mécanique des quatre microstructures génériques sont évalués au travers de l'analyse de la réponse mécanique sous chargement cyclique à 20 °C et 750 °C. On détaille ici la matrice d'essais et les phénomènes que l'on souhaite mettre en évidence.

Des éprouvettes ont été usinées par Mecadec Sannois à partir des ébauches suivant la géométrie spécifiée en annexe A issue de [Bertheaux et al., 2006]. La section dans la zone utile contient au moins 250 grains/colonies quelque soit la microstructure étudiée. Les essais à température ambiante et à 750 °C sont réalisés sous air en utilisant une machine MTS servohydraulique. Les essais sont pilotés en déformation. L'extensomètre est positionné sur la zone utile de l'éprouvette. Les essais à haute température sont réalisés dans un four utilisant trois thermocouples. Les essais cycliques sont tous réalisés sous chargements alternés ( $R_\epsilon = -1$ ).

On souhaite donc mettre en évidence le rôle de la microstructure sur le comportement mécanique sous chargements monotones et cycliques. Les essais réalisés sont ajustés afin d'obtenir un maximum d'informations à partir d'un nombre d'éprouvettes limité. L'objectif est d'analyser :

- l'entrée dans le domaine plastique, défini par la suite comme la transition élasto-plastique ;
- l'écroutissage monotone (i.e. sous chargement monotone) ;

- la sensibilité à la vitesse de déformation ;
- le durcissement/adoucissement cyclique ;
- l'effet Bauschinger.

Les types d'essais réalisés à 20 °C sur chaque microstructure sont détaillés dans le [Tableau 2.3](#). Comme il a été montré que les alliages TiAl sont peu sensibles aux effets de vitesse à cette température, ceux-ci ne sont pas étudiés à ce stade [[Marketz et al., 2003](#)].

Dans un premier temps, un essai de traction classique est réalisé avec une vitesse de déformation de  $\dot{\epsilon} = 10^{-3}s^{-1}$ . L'analyse des résultats permet d'étudier la transition élasto-plastique et l'érouissage.

Dans un second temps, des essais cycliques multi-niveaux sont réalisés. Un schéma représentant le chargement appliqué est présenté en [Figure 2.2](#). Au cours du même essai, le matériau est sollicité successivement à différentes amplitudes de déformation  $\Delta\epsilon/2$ . L'analyse des boucles d'hystérésis (détaillée en [sous-section 2.1.3](#)) permet d'étudier l'effet Bauschinger. Les amplitudes de déformation utilisées ici (0,1 %, 0,2 % puis 0,4 %) permettent aussi d'étudier la transition élasto-plastique dans le cas de chargement cyclique (le comportement étant élastique à 0,1 %).

Essais à 20 °C		
Type essai	Chargement	Phénomènes
Traction	-	- Transition élasto-plastique - Écrouissage monotone
Cyclique multi-niveaux	<a href="#">Figure 2.2</a>	- Transition élasto-plastique - Effet Bauschinger - durcissement/adoucissement cyclique

TABLEAU 2.3 – Types d'essais réalisés à 20 °C et objectifs.

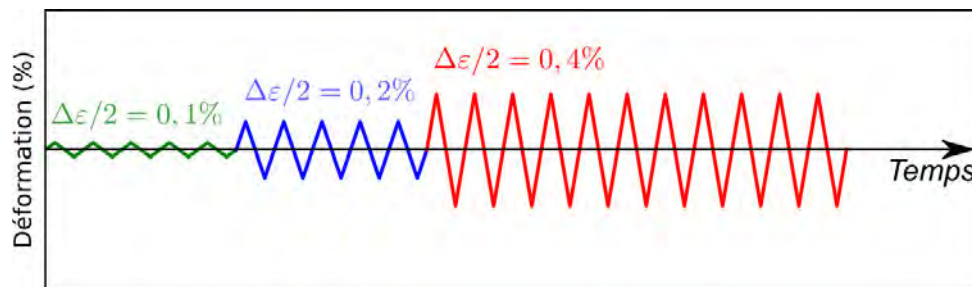


FIGURE 2.2 – Évolution de la déformation appliquée en fonction du temps pour les essais cycliques multi-niveaux à 20 °C. L'amplitude  $\Delta\epsilon/2$  est égale à 0,1 % pour 5 cycles, puis à 0,2 % pour 5 cycles et enfin à 0,4 % jusqu'à la rupture.

À 750 °C, la sensibilité à la vitesse de déformation est étudiée sur chaque microstructure. Les types d'essais réalisés et les phénomènes caractérisés sont détaillés dans le [Tableau 2.4](#).

Un essai de traction multi-vitesses suivi d'une relaxation de 8 h est d'abord effectué. Un schéma décrivant l'essai est présenté en [Figure 2.3](#). Le changement de vitesse permet d'estimer la sensibilité à la vitesse de déformation de la microstructure pour des vitesses de sollicitation classiques. La relaxation de 8 h permet ensuite d'étudier le comportement pour les très faibles vitesses de déformation.

Un essai cyclique multi-niveaux et multi-vitesses est ensuite réalisé. Un schéma représentant le type de chargement appliqué est présenté en [Figure 2.4](#). Au début de l'essai,  $\Delta\epsilon/2 = \epsilon_0$  et

64 cycles sont réalisés avec une vitesse  $\dot{\varepsilon} = 10^{-3} s^{-1}$ , puis 32 cycles avec  $\dot{\varepsilon}_2 = 10^{-4} s^{-1}$  et 16 cycles avec  $\dot{\varepsilon}_2 = 10^{-5} s^{-1}$ . L'amplitude évolue ensuite par pas de 0,2 % jusqu'à la rupture de l'éprouvette.  $\varepsilon_0$  est adaptée à la microstructure étudiée afin d'éviter une rupture prématurée de l'éprouvette.

Essais à 750 °C		
Type essai	Chargement	Phénomènes
Traction multi-vitesses + relaxation de 8h	Figure 2.3	- Transition élasto-plastique - Écrouissage monotone - Sensibilité à la vitesse de déformation
Cyclique multi-niveaux et multi-vitesses	Figure 2.4	- Effet Bauschinger - durcissement/adoucissement cyclique - Sensibilité à la vitesse de déformation

TABLEAU 2.4 – Types d'essais réalisés à 750 °C et phénomènes étudiés.

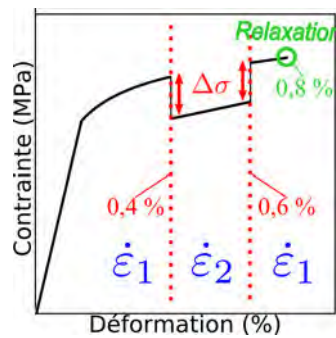


FIGURE 2.3 – Schéma représentant l'évolution de la contrainte en fonction de la déformation pour un essai de traction multi-vitesses suivi d'une relaxation de 8h. Les changements de vitesse s'effectuent à 0,4 % et 0,6 % avec  $\dot{\varepsilon}_1 = 10^{-3} s^{-1}$  et  $\dot{\varepsilon}_2 = 10^{-5} s^{-1}$ . À 0,8 %, la relaxation commence. Le niveau de déformation est fixé et l'on regarde alors l'évolution de la contrainte en fonction du temps.

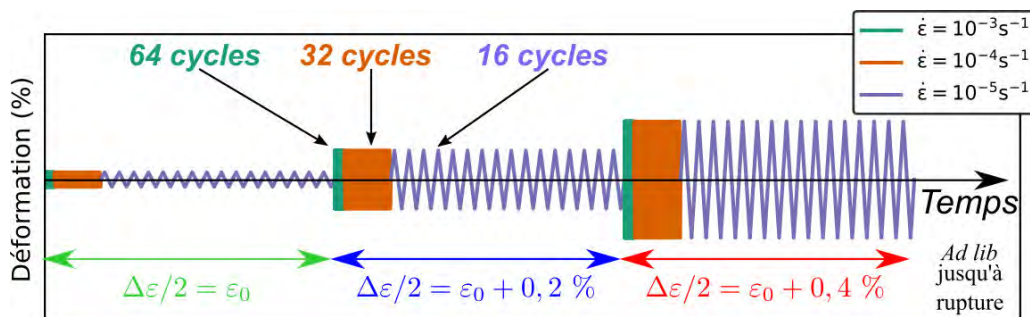


FIGURE 2.4 – Schéma représentant l'évolution de la déformation en fonction du temps pour les essais cyclique multi-niveaux et multi-vitesses à 750 °C.  $\varepsilon_0 = 0,4 \%$  pour les microstructure presque- $\gamma$  et duplex, et  $\varepsilon_0 = 0,2 \%$  pour les microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire.

### 2.1.3 Analyse des boucles d'hystérésis : effet Bauschinger et caractéristiques du comportement cyclique

Le comportement mécanique des matériaux sous chargement cyclique est caractérisé par un effet Bauschinger plus ou moins important. Dans le cas des alliages TiAl, l'étude bibliographique a montré que cet effet est très prononcé (voir chapitre 1 et [Paul et al., 2016]). L'effet Bauschinger est défini comme la réduction de la limite d'élasticité lors de l'inversion du sens de chargement [Bauschinger, 1886]. [Choteau, 1999] a montré qu'il existe autant de façons de discuter cet effet par la définition de divers paramètres que d'auteurs ayant publié sur ce sujet. De fait, on fait ici le choix d'analyser l'effet Bauschinger à partir de grandeurs et d'observations aidant à l'objectif global du travail, soit la définition d'un modèle de plasticité pour la simulation du comportement mécanique. Des schémas représentant le comportement typique d'un matériau au cours du premier cycle de chargement et décomposant les phénomènes responsables de l'effet Bauschinger sont présentés Figure 2.5.

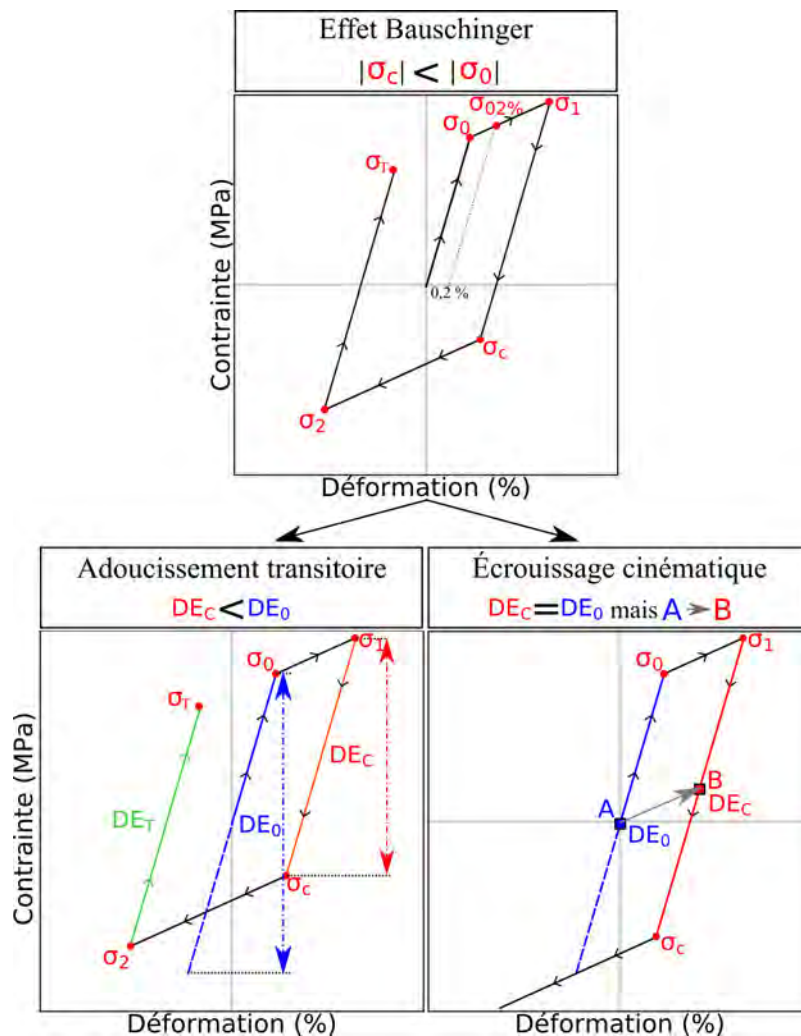


FIGURE 2.5 – Schéma représentant le comportement mécanique observé au cours du premier cycle de chargement, l'effet Bauschinger, et les différents phénomènes responsables de son apparition.  $\sigma_0$  est la limite d'élasticité,  $\sigma_{0.2\%}$  est la limite d'élasticité à 0,2 %,  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  sont respectivement les contraintes maximales et minimales,  $\sigma_C$  et  $\sigma_T$  sont respectivement les limites d'élasticité en compression et en traction.  $DE_0$ ,  $DE_C$  et  $DE_T$  sont respectivement le domaine élastique initial, le domaine élastique en compression et le domaine élastique en traction.

Pour la traction et le premier cycle des tests cycliques, la limite d'élasticité  $\sigma_0$  est définie comme la contrainte à partir de laquelle de la déformation plastique permanente est mesurée. La limite d'élasticité à 0,2 %,  $\sigma_{0.2\%}$ , correspond à la contrainte à 0,2 % de déformation plastique. Un effet Bauschinger est observé si, après l'inversion du sens de chargement, la valeur absolue de la limite d'élasticité en compression  $\sigma_C$  est inférieure à la valeur absolue de la limite d'élasticité  $\sigma_0$  ( $|\sigma_C| < |\sigma_0|$ ).

L'effet Bauschinger peut être causé par un **adoucissement transitoire**. Ce phénomène correspond à une réduction de la taille du domaine élastique initial  $DE_0$  qui devient  $DE_C$  après l'inversion du sens de chargement [Pragnell et al., 1992, Pragnell et al., 1995, Choteau, 1999]. Il s'agit donc d'un écrouissage isotrope négatif soudain. On propose de quantifier cet adoucissement transitoire  $AT_{OC}$  en calculant simplement  $AT_{OC} = DE_0 - DE_C$ . Dans le cas des alliages TiAl, ce phénomène est particulièrement prononcé [Paul et al., 2016].

Dans le cas où  $DE_0 = DE_C$ , l'effet Bauschinger peut aussi être causé par de l'**écrouissage cinématique**. Cet écrouissage est défini comme un déplacement du centre du domaine élastique initial  $A$ , qui devient  $B$  lors de l'inversion du sens de chargement. De fait, on retrouve là aussi une limite d'élasticité en compression plus faible ( $|\sigma_c| < |\sigma_0|$ ).

Ces phénomènes sont la plupart du temps couplés et ont été observés dans le cas des alliages TiAl. On précise que les études classiques portant sur l'effet Bauschinger font mention d'un autre phénomène, l'adoucissement permanent (voir [Brown and Stobbs, 1976] ou [Choteau, 1999]). Comme il a déjà été montré par [Paul et al., 2016] que ce phénomène n'est pas observé dans le cas des alliages TiAl, il n'est pas détaillé ni discuté par la suite.

En ce qui concerne les autres caractéristiques du comportement mécanique cyclique, les boucles d'hystérésis issues d'essais cycliques alternés ( $R_\varepsilon = -1$ ) peuvent aussi révéler une **dissymétrie** entre les phases de traction et de compression [Smith et al., 2018]. Une telle dissymétrie peut correspondre à une différence entre la contrainte maximale  $\sigma_1$  et la contrainte minimale  $\sigma_2$  au cours d'un cycle. Elle peut aussi correspondre à une différence de taille entre les domaines élastique en compression  $DE_C$  et en traction (seconde inversion du sens de chargement)  $DE_T$  (voir Figure 2.5). On mesurera alors aussi l'adoucissement transitoire en traction  $AT_{OT}$  tel que  $AT_{OT} = DE_0 - DE_T$ .

Les évolutions des tailles des domaines élastiques, des contraintes maximales et minimales au cours d'un cycle ainsi que la forme des boucles d'hysteresis sont aussi étudiées pour discuter d'un potentiel **durcissement/adoucissement cyclique**.

Enfin, en ce qui concerne la **sensibilité aux effets de vitesse**, celle-ci est discutée en évaluant les sauts de contrainte qui apparaissent lors des changements de vitesses de déformation comme présenté en Figure 2.3.

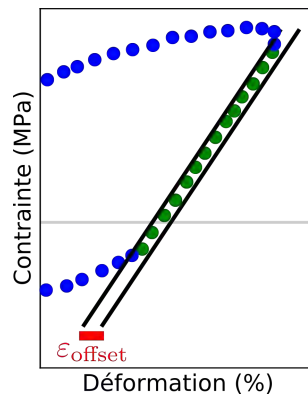


FIGURE 2.6 – Schéma représentant la méthode employée pour la mesure de la taille des domaines élastiques.  $\varepsilon_{\text{offset}} = (3 \pm 2) \times 10^{-5}$ .



La taille du domaine élastique est mesurée en utilisant la méthode de Cottrell [Cottrell and Dexter, 1954]. Cette méthode a été éprouvée et discutée ailleurs [Kuhlmann-Wilsdorf and Laird, 1979, Feugas and Haddou, 2003, Fournier et al., 2006]. Un schéma résumant son principe est présenté en Figure 2.6. Les points expérimentaux se situant entre deux droites parallèles séparées d'un offset  $\varepsilon_{\text{offset}}$  sont extraits. Ces droites ont une pente égale au module d'Young. L'offset est défini en fonction de la sensibilité de l'extensomètre. Dans notre cas,  $\varepsilon_{\text{offset}} = (3 \pm 2) \times 10^{-5}$ . Dans certains cas, le module d'Young change au cours de l'essai et doit être ajusté pour la détection du domaine élastique [Dong et al., 2017]. Cela n'a pas été nécessaire dans notre étude.

## 2.1.4 Résultats de la campagne d'essais

### 2.1.4.1 Essais à 20 °C

Les courbes contrainte-déformation issues des essais de traction à température ambiante sont présentées en Figure 2.7. La ductilité est limitée quelque soit la microstructure.

La microstructure presque- $\gamma$  a la contrainte la plus élevée et montre une transition élasto-plastique particulière en forme de bosse : lorsque la limite d'élasticité est atteinte, la contrainte diminue soudainement.

Pour la microstructure duplex, on observe une transition élasto-plastique nette (i.e. changement de pente marqué entre le domaine élastique et le domaine plastique).

Les microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire ont une transition élasto-plastique moins marquée. On remarque que leurs limites d'élasticité  $\sigma_0$  sont quasiment égales alors que leurs limites  $\sigma_{0.2\%}$  sont très différentes. L'écroûissage de la microstructure presque-lamellaire est bien plus important que celui de la microstructure totalement-lamellaire.

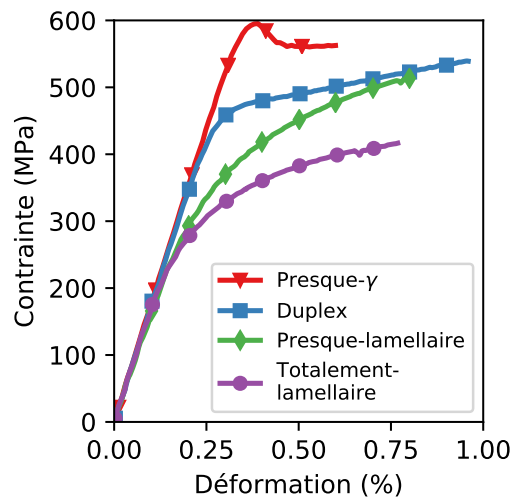


FIGURE 2.7 – Courbes contrainte-déformation issues des essais de traction à température ambiante à  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{s}^{-1}$ .

On propose de détailler l'analyse des résultats de l'essai cyclique multi-niveaux réalisé sur la microstructure duplex pour mettre en évidence l'effet Bauschinger. Les courbes contraintes-déformation obtenues pour les amplitudes de déformation successives sont présentées en Figure 2.8.

Pour  $\Delta\varepsilon/2 = 0,1\%$  et  $\Delta\varepsilon/2 = 0,2\%$ , le comportement observé est élastique. On peut donc estimer que la taille du domaine élastique initial  $DE_0$  est bien  $DE_0 = 2\sigma_0$  avec  $\sigma_0$  la limite d'élasticité du matériau. À  $\Delta\varepsilon/2 = 0,4\%$ , on entre dans le domaine plastique. Les tailles des domaines élastiques en compression  $DE_C$  et en traction  $DE_T$  observées sont alors bien inférieures à la taille du domaine élastique initial  $DE_0$ . Il y a donc un adoucissement transitoire.

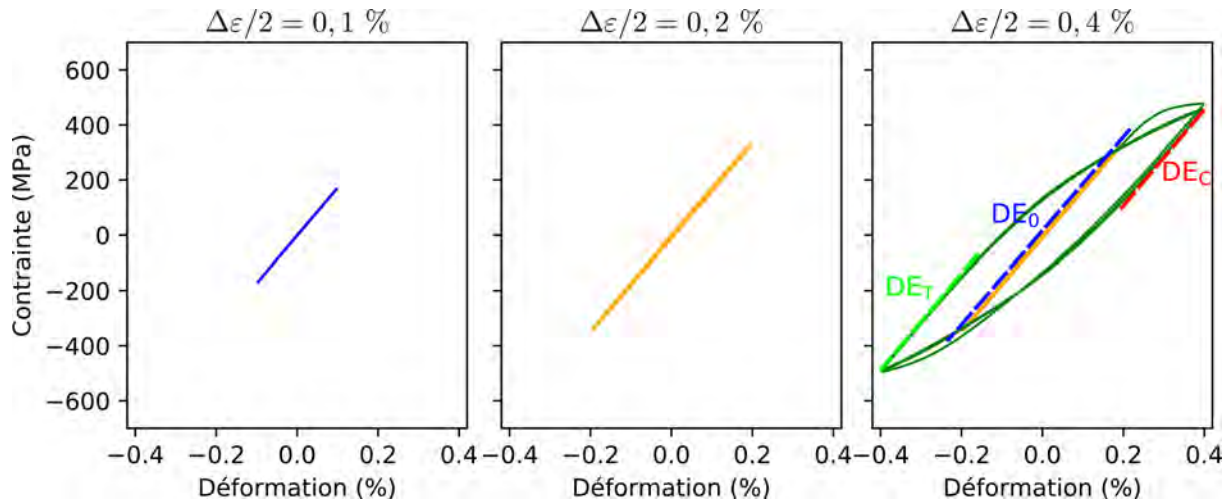


FIGURE 2.8 – Courbes contrainte-déformation issues de l'essai cyclique multi-niveaux réalisé sur la microstructure duplex à 20 °C pour  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} s^{-1}$ .

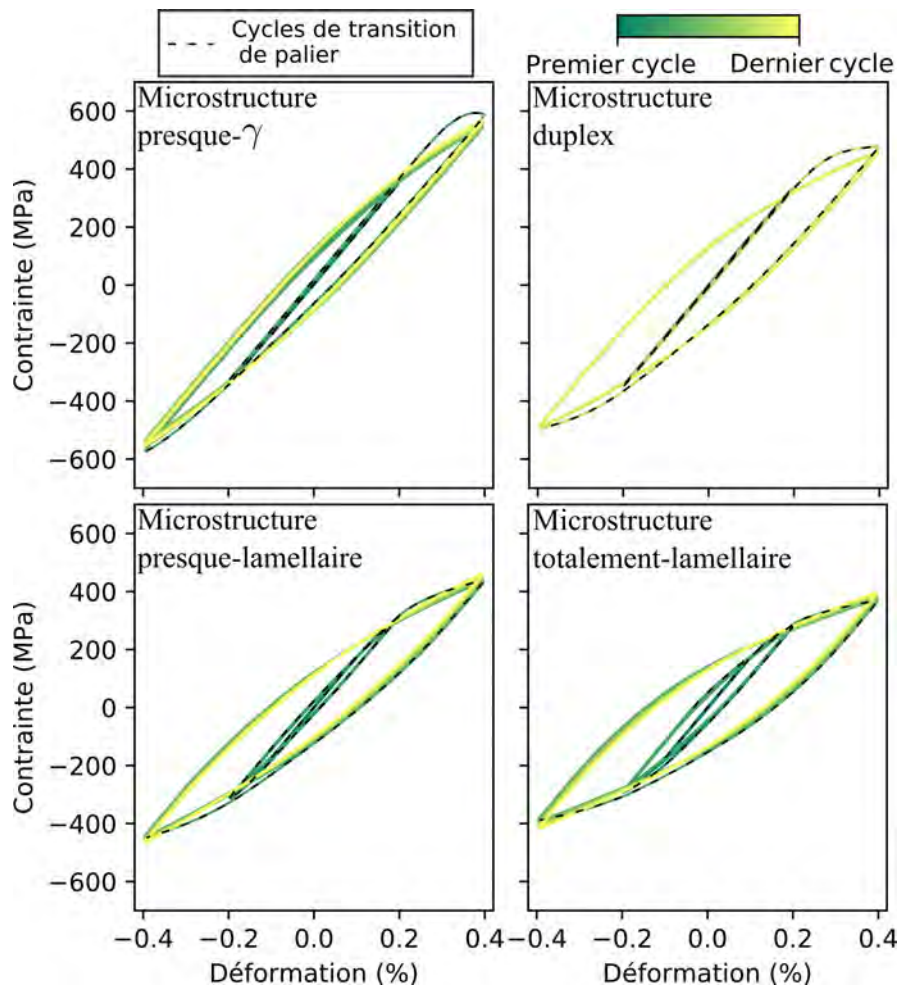


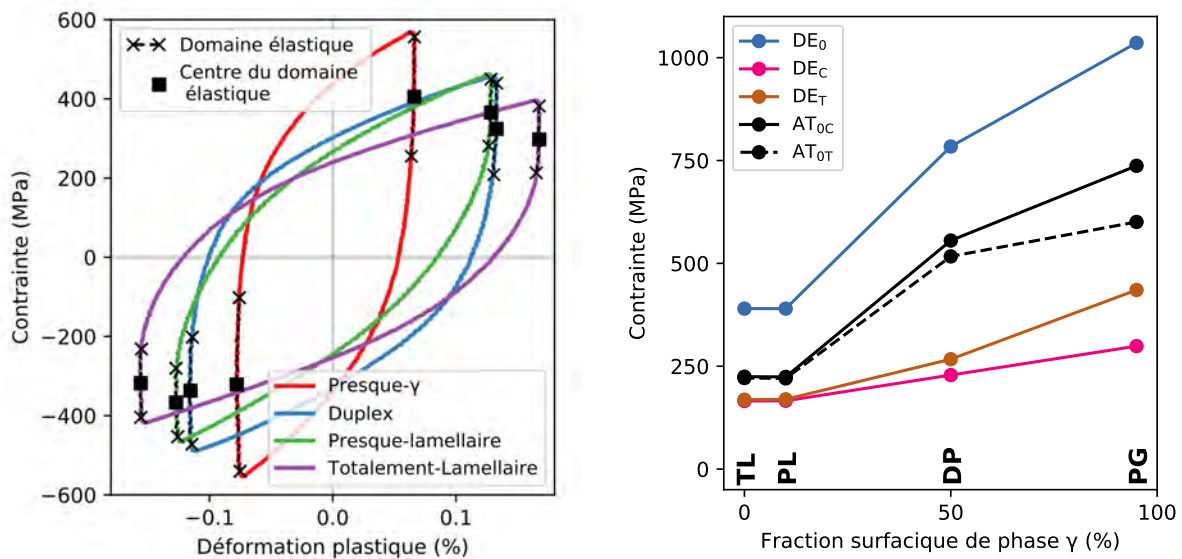
FIGURE 2.9 – Courbes contrainte-déformation issues des essais cycliques multi-niveaux à 20 °C pour  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} s^{-1}$ .

Les résultats des essais cycliques multi-niveaux à 20 °C pour toutes les microstructures sont présentés en Figure 2.9. Pour tirer les conclusions indiquées ci-dessous, le même type d'analyse

que celle présentée dans le cas de la microstructure duplex (Figure 2.8) a été réalisée.

Pour toutes les microstructures, le comportement au cours du premier palier est élastique et  $\sigma_0$  n'est pas atteint. Après l'entrée dans le domaine plastique et l'inversion du sens de chargement, un effet Bauschinger est observé car  $|\sigma_C| < |\sigma_0|$ . Cet effet sera analysé par la suite. Le cycle stabilisé est immédiatement atteint car seuls les cycles de transition de palier (traits pointillés en Figure 2.9) sont différents des autres. Il n'y a pas de modification de la forme des boucles avant rupture et l'on n'observe pas de durcissement cyclique notable car les boucles sont toutes superposées. Ce dernier point est à prendre avec précaution car relativement peu de cycles ont été réalisés avant la rupture des éprouvettes.

La comparaison entre les microstructure totalement-lamellaire et presque-lamellaire est intéressante. Dans les deux cas, les boucles d'hystérésis sont ouvertes à partir de  $\Delta\varepsilon/2 = 0,2\%$  car les limites d'élasticité sont similaires. Néanmoins, les boucles de la microstructure totalement-lamellaire sont beaucoup plus ouvertes.



(a) Boucles contrainte-déformation plastique du cycle stabilisé à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,4\%$ .

(b) Evolution de la taille du domaine élastique  $DE$  et de l'adoucissement de transition  $AT$  en fonction de la fraction surfacique de phase  $\gamma$ . Les suffixes 0, C et T renvoient respectivement à la taille initiale, à la taille en compression et en traction. **PG, DP, NL et TL** correspondent respectivement à presque- $\gamma$ , duplex, presque-lamellaire et totalement-lamellaire.

FIGURE 2.10 – Analyse de l'effet Bauschinger à partir des essais réalisés à  $20\text{ °C}$  sur le cycle stabilisé à  $0,4\%$ .

Afin de déterminer l'influence de la microstructure sur l'effet Bauschinger, l'évolution de la contrainte en fonction de la déformation plastique est présentée en Figure 2.10a pour les cycles stabilisés à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,4\%$ . Sur ces courbes, la taille des domaines élastiques correspond au delta de contrainte pour lequel aucune déformation plastique n'est observée.

La taille des domaines élastiques initiaux  $DE_0$  des microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire est identique. Pourtant, sur cette figure on observe que le centre du domaine élastique de la microstructure presque-lamellaire (carré sur la courbe verte) est à un niveau de contrainte plus élevé que celui de la microstructure totalement-lamellaire (carré sur

la courbe magenta). L'écroissage cinématique de la microstructure presque-lamellaire est donc supérieur à celui de la microstructure totalement-lamellaire.

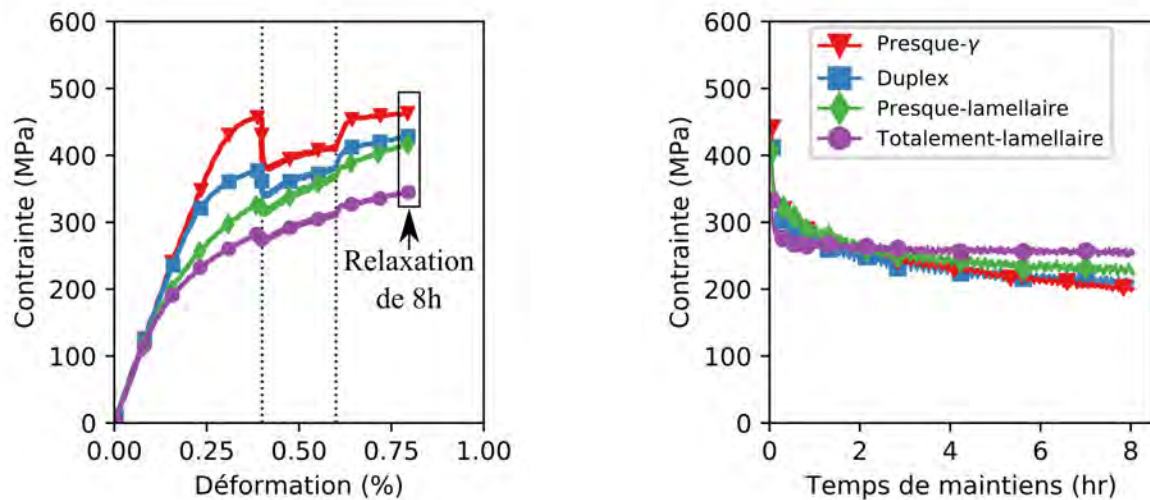
Les évolutions de la taille des domaines élastiques et des adoucissements transitoire en fonction de la fraction surfacique de phase  $\gamma$  sont présentées en Figure 2.10b. Les mesures ont toutes été réalisées sur les boucles d'hystérésis du cycle stabilisé à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,4 \%$ . L'adoucissement transitoire en compression  $AT_{0C}$  (trait noir continu) augmente significativement avec la fraction surfacique de phase  $\gamma$ . C'est aussi le cas de l'adoucissement transitoire en traction  $AT_{0T}$  (trait noir discontinu). On remarque que  $AT_{0C}$  et  $AT_{0T}$  sont différents pour les microstructures duplex et presque- $\gamma$ . Il y a donc une dissymétrie entre traction et compression pour les microstructures à forte teneur en grains  $\gamma$ .

On note aussi que les adoucissements transitoires des deux microstructures lamellaires sont identiques : c'est donc le niveau d'écroissage cinématique qui distingue les comportements de ces deux microstructures. Par ailleurs, l'adoucissement transitoire observé est relativement faible.

En conclusion, dans le cas des microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire, l'effet Bauschinger est principalement causé par de l'écroissage cinématique, tandis que dans le cas des microstructures presque- $\gamma$  et duplex, celui-ci est causé principalement par de l'adoucissement transitoire.

#### 2.1.4.2 Essais à 750 °C

Les résultats des essais de traction multi-vitesses suivis d'une relaxation de 8 h à 750 °C sont présentés en Figure 2.11. La partie traction de l'essai est présentée en Figure 2.11a.



(a) Partie traction avec changement de vitesse à  $\varepsilon = 0,4 \%$  et  $\varepsilon = 0,6 \%$

(b) Partie relaxation. Évolution de la contrainte en fonction du temps.

FIGURE 2.11 – Résultats des essais de traction multi-vitesses suivis d'une relaxation de 8 h à 750 °C.

L'allongement à rupture à 750 °C est sensiblement meilleur qu'à 20 °C car aucune des éprouvettes n'a rompu. Une diminution générale des grandeurs mécaniques classiques (module d'Young, limite d'élasticité) est observée par rapport aux essais à 20 °C. Malgré tout, la hiérarchie des microstructures est identique et les observations faites pour les essais à 20 °C vis-à-vis de la transition élasto-plastique et de l'écroissage sont toujours valables. Dans le cas de la microstructure presque- $\gamma$ , il est difficile de conclure sur la présence d'une bosse lors de la transition

élasto-plastique car le changement de vitesse a été réalisé dans le domaine où celle-ci aurait pu apparaître.

Le changement de vitesse révèle l'impact de la microstructure sur la sensibilité aux effets de vitesse pour des vitesses de sollicitation classiques. Plus le saut de contrainte observé est important, plus la microstructure est sensible aux effets de vitesse. La microstructure presque- $\gamma$  présente donc le plus de sensibilité à la vitesse de déformation, suivie de la microstructure duplex. Les microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire peuvent être considérées insensibles à ce changement de vitesse.

L'évolution de la contrainte en fonction du temps lors des relaxations de 8h (maintien à 0,8 % de déformation) est tracée en Figure 2.11b. Ce type de chargement révèle donc le comportement des différentes microstructures pour de très faibles vitesses de sollicitation. On observe pour ce régime que la microstructure presque-lamellaire relaxe beaucoup plus que la microstructure totalement-lamellaire. Cela signifie qu'une faible présence de grains  $\gamma$  équiaux peut profondément modifier le comportement observé pour les très faibles vitesses de déformation.

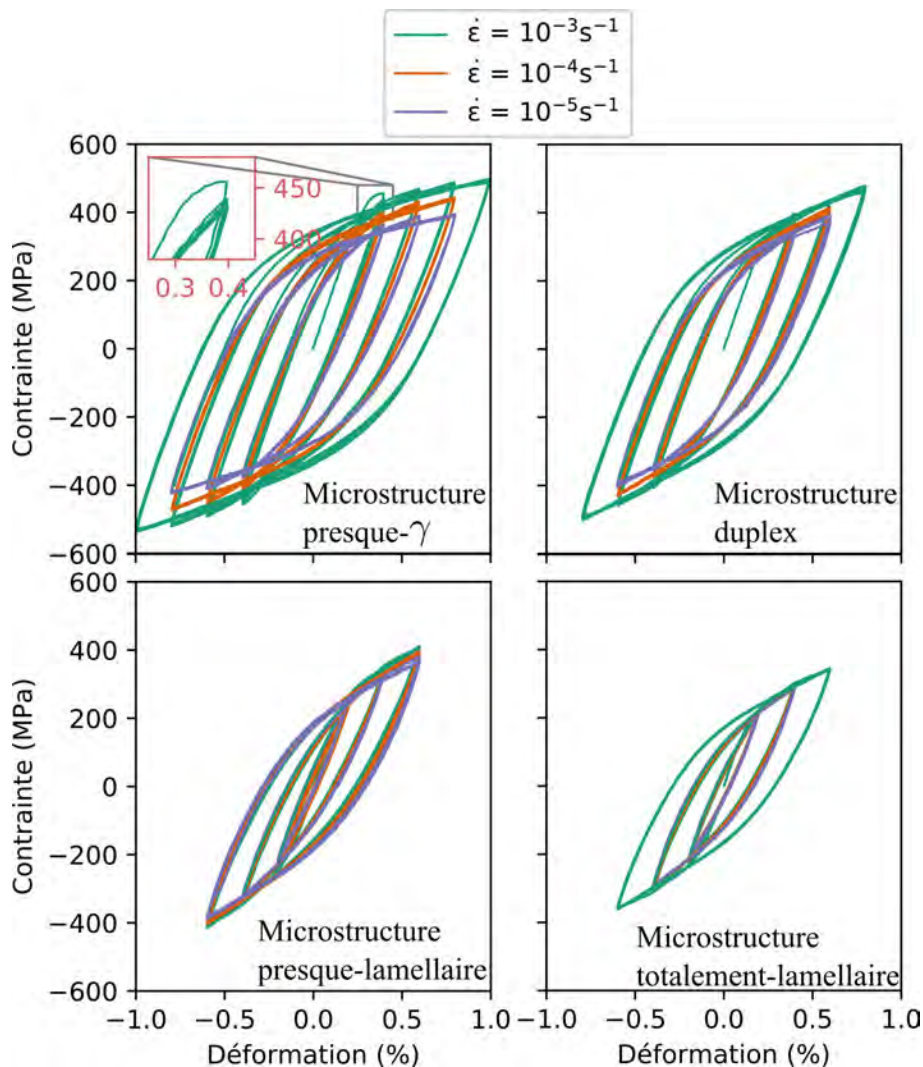


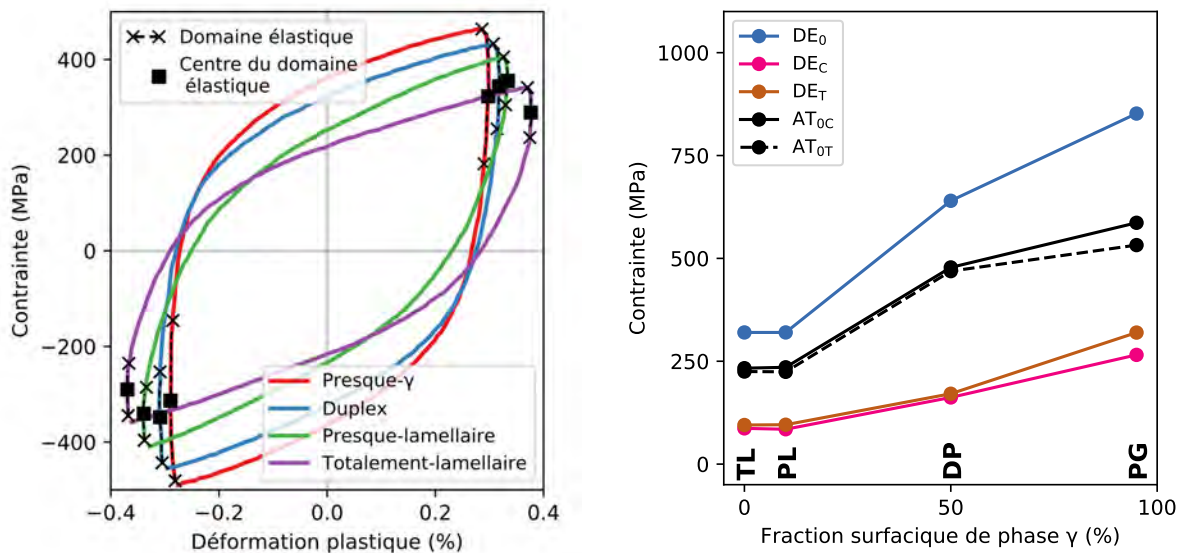
FIGURE 2.12 – Résultats des essais cycliques multi-niveaux et multi-vitesses à 750 °C. Pour chaque demi-amplitude de déformation, 64 cycles sont réalisés à  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} s^{-1}$  (boucles vertes), 32 à  $\dot{\epsilon} = 10^{-4} s^{-1}$  (boucles oranges) et 16 à  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} s^{-1}$  (boucles violettes).

Les résultats des essais cycliques multi-niveaux et multi-vitesses sont présentés en Figure 2.12.

Chaque couleur correspond à une vitesse de déformation. Si les différentes couleurs sont superposées, alors la microstructure présente peu de sensibilité à la vitesse de déformation. Un effet Bauschinger est aussi observé pour toutes les microstructures car les limites d'élasticité en compression  $|\sigma_c|$  sont toutes inférieures à la limite d'élasticité  $|\sigma_0|$ . L'origine de cet effet sera analysé par la suite. Pour la microstructure presque- $\gamma$ , la bosse est observable au premier palier de déformation. Elle entraîne un adoucissement transitoire significatif lors du premier cycle. Cela signifie que les mécanismes de déformation associés à la transition élasto-plastique sont similaires à 20 °C et 750 °C. Le cycle stabilisé est atteint immédiatement. Il n'y a pas de durcissement ni d'adoucissement cyclique car les boucles sont toutes superposées.

On retrouve la même hiérarchie de sensibilité à la vitesse de déformation que celle observée pour les essais de traction multi-vitesses (Figure 2.11a) : la microstructure presque- $\gamma$  est la plus sensible, suivie de la microstructure duplex, de la microstructure presque-lamellaire et de la microstructure totalement-lamellaire. La sensibilité à la vitesse de déformation augmente donc avec la fraction volumique de grains  $\gamma$  équiaxes.

Pour analyser l'effet Bauschinger, les courbes contrainte-déformation plastique au cycle stabilisé à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,6\%$  sont présentées en Figure 2.13. Les observations sont identiques à celles réalisées précédemment pour les essais à 20 °C : l'écroutissage cinématique de la microstructure presque-lamellaire est plus important que celui de la microstructure totalement-lamellaire.



(a) Boucles d'hystérésis contrainte-déformation plastique à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,6\%$ .

(b) Evolution de la taille du domaine élastique  $DE$  et de l'adoucissement de transition  $AT$  en fonction de la fraction surfacique de phase  $\gamma$ . Les suffixes 0, C et T renvoient respectivement à la taille initiale, à la taille en compression et en traction. **PG**, **DP**, **NL** et **TL** correspondent respectivement à presque- $\gamma$ , duplex, presque-lamellaire et totalement-lamellaire.

FIGURE 2.13 – Analyse de l'effet Bauschinger à partir des essais réalisés à 750 °C sur le cycle stabilisé à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,6\%$  et  $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}s^{-1}$ .

L'évolution de la taille des domaines élastiques et des adoucissements transitoires en fonction de la fraction surfacique de phase  $\gamma$  sont présentées en Figure 2.13b. Les mesures ont toutes été réalisées sur les boucles d'hystérésis des cycles stabilisés à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,6\%$  à la vitesse  $\dot{\varepsilon} = 10^{-3}s^{-1}$ .

L'adoucissement transitoire en compression  $AT_{0C}$  (trait noir continu) augmente là aussi avec la fraction surfacique de phase  $\gamma$ . On note que l'adoucissement transitoire mesuré ici est quasiment identique à celui observé à température ambiante pour toutes les microstructures (Figure 2.10b). Par ailleurs, les adoucissements transitoires en compression  $AT_{0C}$  (trait noir continu) et en traction  $AT_{0T}$  (trait noir discontinu) sont cette fois proches pour les microstructures duplex et presque- $\gamma$ . La dissymétrie traction-compression observée à 20 °C a donc disparu.

Les conclusions sont les mêmes qu'à 20 °C : l'effet Bauschinger est principalement causé par de l'écroutissage cinématique pour les microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire, et par de l'adoucissement transitoire pour les microstructures presque- $\gamma$  et duplex.

### 2.1.5 Analyse des résultats et lien avec les mécanismes de déformation

Les résultats obtenus montrent que l'effet de la microstructure sur le comportement mécanique est significatif. L'évolution de la limite d'élasticité en fonction de la taille des colonies lamellaires est présentée en Figure 2.14. La hiérarchie des microstructures en terme de niveau de contrainte est similaire à ce que l'on observe ailleurs dans la littérature [Kim and Dimiduk, 1991, Couret et al., 2008].

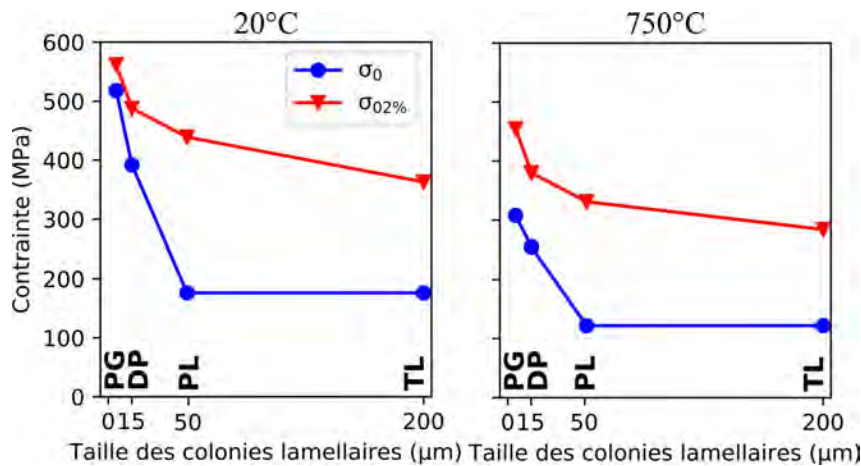


FIGURE 2.14 – Évolution de la limite d'élasticité en fonction de la taille des colonies lamellaires. **PG**, **DP**, **NL** et **TL** correspondent respectivement à presque- $\gamma$ , duplex, presque-lamellaire et totalement-lamellaire. La taille des grains  $\gamma$  est d'environ 8  $\mu\text{m}$  dans les microstructures presque- $\gamma$ , duplex et presque-lamellaire.

On retrouve une relation de Hall-Petch classique entre la limite d'élasticité à 0,2 % et la taille des grains/colonies. Cela peut paraître surprenant que les niveaux de contrainte des microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire soient plus faibles alors que la taille des lamelles dans les colonies est submicrométrique. Il s'agit néanmoins d'un résultat classique (voir [Kabir et al., 2015]). En effet, dans ces microstructures, la déformation se produit initialement dans les colonies favorablement orientées, dans lesquelles le glissement est parallèle au plan d'interface lamellaire. Le libre parcours moyen des dislocations est alors de l'ordre de la taille des colonies.

Le comportement mécanique des différentes microstructures des alliages TiAl peut être classés en deux catégories, l'une correspondant aux microstructures à forte teneur en grains  $\gamma$ , l'autre aux microstructures à forte teneur en colonies lamellaires. On propose de discuter ces comportements en lien avec les mécanismes élémentaires de déformation détaillés dans l'étude bibliographique (voir chapitre 1). On rappelle qu'à 20 °C et 750 °C, les alliages TiAl se déforment plastiquement par le glissement des dislocations ordinaires et par maclage (voir chapitre 1). À 750 °C, la déformation est facilitée par l'activation du glissement dévié et de la montée. Enfin,

les colonies lamellaires ont un comportement plastique fortement anisotrope : les colonies lamellaires favorablement orientées par rapport à l'axe de chargement se déforment bien avant les autres.

### **Comportement des microstructures à forte teneur en grains $\gamma$**

Le premier comportement est celui associé aux microstructures contenant une proportion importante de grains  $\gamma$  équiaxes, c'est-à-dire dans notre cas les microstructures presque- $\gamma$  et duplex. Ce comportement est d'abord caractérisé par une transition élasto-plastique marquée (i.e. changement de pente soudain entre le domaine élastique et le domaine plastique). Dans le cas de la microstructure presque- $\gamma$ , une bosse est observée.

Cette bosse a été associée à l'activation du maillage via des mesures d'émissions acoustiques [Kauffmann et al., 2000b, Marketz et al., 2003]. La nucléation des macles étant plus difficile que leur propagation [Farenc et al., 1993], une fois la contrainte nécessaire à l'activation du maillage atteinte, une contrainte plus faible suffit à leur propagation.

La deuxième caractéristique de ce comportement est l'apparition d'un effet Bauschinger prononcé dans le cas de chargements cycliques. Cet effet Bauschinger est causé par un adoucissement transitoire conséquent : la taille du domaine élastique diminue de plus de 500 MPa lors de l'inversion du sens de chargement. Une dissymétrie entre les phases de traction et de compression des essais cycliques à 20 °C est observée. Sur la base d'observations issues de la littérature, un scénario expliquant l'origine de ces phénomènes peut être défini.

Des macles sont générées à la première montée en charge lors de l'entrée dans le domaine plastique, générant ainsi de nouvelles interfaces dans les grains comme observé dans une microstructure presque- $\gamma$  par [Beran et al., 2016]. Les dislocations ordinaires interagissent avec ces interfaces, ce qui crée une contrainte de retour d'après [Zghal and Couret, 2001, Karaman et al., 2001, Fan et al., 2015]. Lorsque le sens de chargement est inversé, de nouveaux modes de déformation sont activés : de nouveaux systèmes de macles compatibles avec le sens de déformation en compression sont opérationnels, les dislocations ordinaires vont glisser en sens inverse (à vecteur de Burgers constant), et des mouvements en arrière de dislocations de macle ont lieu (observés par [Farenc et al., 1993, Beran et al., 2016]). Ces trois types de modes de déformation sont facilités par la contrainte de retour créée par la déformation en traction. Ils sont donc à l'origine de l'adoucissement transitoire qui crée l'effet Bauschinger [Karaman et al., 2001]. À 750 °C, le scénario est similaire. La bosse est moins prononcée car le mouvement des dislocations est facilité par le glissement dévié et la montée : le rôle du maillage est donc moins important.

En ce qui concerne les autres caractéristiques du comportement cyclique, le faible nombre de cycles réalisé à 20 °C ne permet pas de conclure sur la présence d'un éventuel durcissement ou adoucissement cyclique. Néanmoins, différents auteurs ont bien observé un durcissement cyclique sur ce type de microstructure qu'ils ont associé à la formation d'une structure veine et l'interaction entre macles et dislocations [Gloanec et al., 2005, Berteaux et al., 2006, Gloanec et al., 2007]. À 750 °C, les essais permettent par contre d'affirmer qu'il n'y a pas de durcissement cyclique. La boucle stabilisée est atteinte immédiatement. La même chose est observée dans la littérature [Gloanec et al., 2007, Naanani et al., 2018]. Il semble qu'à une demi-amplitude de déformation donnée, les macles grossissent mais le réseau ne change pas drastiquement.

### **Comportement des microstructures à forte teneur en colonies lamellaires**

Le deuxième type de comportement est celui des microstructures à forte teneur en colonies lamellaires, soit dans notre cas les microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire. Leur comportement est d'abord caractérisé par une transition élasto-plastique peu marquée. Ce phénomène peut s'expliquer par l'anisotropie plastique des colonies lamellaires. En effet, les colonies lamellaires favorablement orientées se déforment bien avant d'atteindre la limite d'élasticité



macroscopique [Edwards et al., 2019b, Botten et al., 2001]. On suggère donc que, contrairement au cas des microstructures à forte teneur en grains  $\gamma$  pour lesquelles la transition élasto-plastique est soudaine, la transition élasto-plastique est ici séquentielle du fait de l'anisotropie plastique des colonies lamellaires. C'est-à-dire que lorsque la déformation et la contrainte augmentent, les colonies lamellaires se déforment les unes après les autres.

La réalisation d'essais macroscopiques ne permet donc pas de capter la véritable transition élasto-plastique : dans le domaine plastique macroscopique, les dislocations ont en réalité déjà fortement interagi avec les différents éléments de la microstructures. Cela explique pourquoi les deux microstructures étudiées ici présentent la même limite d'élasticité  $\sigma_0$ , qui correspond aux premiers glissements de dislocation observables à l'échelle macroscopique, alors que leurs tailles de lamelles et de colonies sont différentes. L'influence de ces paramètres microstructuraux n'est donc visible qu'après écrouissage sur la limite  $\sigma_{02\%}$ .

Lors de chargements cycliques, un effet Bauschinger est observé, mais cette fois causé principalement par un écrouissage cinématique élevé. Les mécanismes de déformation sont les mêmes que pour les microstructures à forte teneur en grains  $\gamma$  (dislocations ordinaires et maclages), mais se produisent à l'échelle des lamelles. Deux sources de contrainte de retour supplémentaires viennent alors s'ajouter. La première source vient de l'interaction des différents mécanismes avec les interfaces lamellaires. La deuxième source vient de l'interaction entre les colonies lamellaires déformées plastiquement et celles qui ne le sont pas encore [Paul et al., 2016, Hoppe and Appel, 2014]. La contrainte de retour est donc extrêmement importante ce qui explique l'écrouissage cinématique observé.

### Analyse de la sensibilité à la vitesse de déformation

En ce qui concerne la sensibilité à la vitesse de déformation, pour des vitesses entre  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  et  $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ , les résultats des essais de traction multi-vitesses (Figure 2.11) et des essais cycliques multi-niveaux et multi-vitesses (Figure 2.12) montrent que, plus une microstructure contient de grains  $\gamma$ , plus celle-ci est sensible à la vitesse de déformation. Les grains  $\gamma$  contrôlent donc la sensibilité à la vitesse de déformation, tandis que les colonies lamellaires y sont à l'inverse insensibles.

Pour les très faibles vitesses de déformation, l'analyse de la partie relaxation des essais de traction multi-vitesses (Figure 2.11) montre que l'ajout d'une faible proportion de grains  $\gamma$  modifie significativement le comportement mécanique.

## 2.1.6 Essais de fatigue-temps de maintien à 750 °C

On propose d'ouvrir la discussion en réalisant des essais plus complexes se rapprochant des sollicitations vues par le matériau dans des applications aube de turbine : des essais de fatigue-temps de maintien. L'existence d'une microstructure optimisée pour l'application envisagée est discutée sur la base du comportement observé.

### 2.1.6.1 Chargement et méthode d'analyse

Les essais sont pilotés en contrainte et réalisés à 750 °C. Le chargement alterné appliqué est présenté en Figure 2.15. Les essais sont de type 10-300-10 avec une montée jusqu'à 300 MPa en 10 s, un maintien à 300 MPa de 300 s, et une descente à 0 MPa en 10 s. Ces essais étant particulièrement longs à réaliser, ils sont arrêtés après une journée, ce qui représente environ 140 cycles. L'idée est là encore d'avoir une vision globale du comportement des différentes microstructures.

La contrainte appliquée de 300 MPa a été déterminée à partir des résultats des essais précédents. Elle correspond à un niveau moyen pour les quatre microstructures étudiées. Pour les

microstructures presque- $\gamma$  et duplex, on se situe dans le domaine élastique (Figure 2.7). Pour les microstructures lamellaires, on se situe approximativement au début domaine plastique.

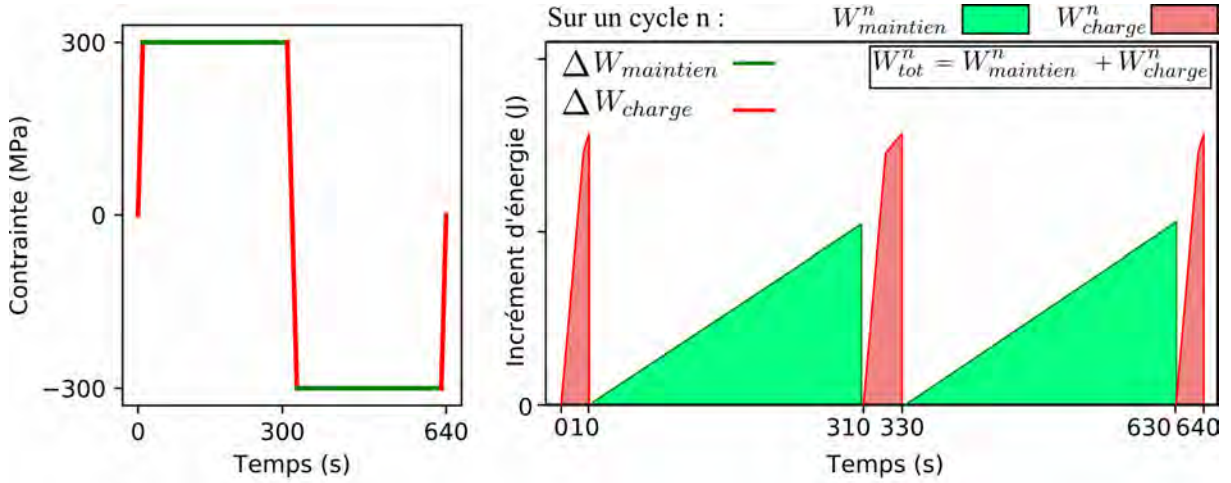


FIGURE 2.15 – À gauche, schéma représentant le chargement imposé au cours des essais de fatigue-temps de maintien. À droite, schéma représentant l'évolution des incréments d'énergie en fonction du temps avec  $\Delta W_{\text{maintien}}$  et  $\Delta W_{\text{charge}}$  respectivement les incréments lors des phases de maintien et des phases de charge. L'aire verte représente l'énergie totale dissipée au cours d'un cycle  $n$  lors des phases de maintien  $W_{\text{maintien}}^n$ . L'aire rouge correspond à l'énergie dissipée au cours d'un cycle  $n$  lors des phases de charge  $W_{\text{charge}}^n$ .

Au cours d'un cycle de fatigue-temps de maintien, deux types de phases peuvent être distinguées :

- les phases de maintien à  $\sigma = \pm 300$  MPa (traits verts, partie plate sur les courbes à  $\sigma = \pm 300$  MPa en Figure 2.15) ;
- les phases de charge/décharge de  $\sigma = 0$  à  $\sigma = \pm 300$  MPa (traits rouges en Figure 2.15).

On propose alors d'étudier les résultats des essais en se basant sur une décomposition de l'énergie de déformation dissipée au cours d'un cycle [Garud, 1981, Ellyin and Kujawski, 1984]. Un incrément d'énergie dissipée  $\Delta W_{\text{tot}}$  est défini comme :

$$\Delta W_{\text{tot}} = \sigma \Delta \varepsilon^p \quad (2.1)$$

avec  $\Delta \varepsilon^p$  l'incrément de déformation plastique.

Au cours d'un cycle, on peut distinguer les incréments d'énergie dissipée pendant les phases de charge  $\Delta W_{\text{charge}}$  des incréments d'énergie dissipée pendant les phases de maintien  $\Delta W_{\text{maintien}}$ . Un schéma présentant l'évolution des incréments d'énergie en fonction du temps au cours d'un cycle permettant de visualiser cette distinction est proposé en Figure 2.15.

L'énergie  $W_{\text{tot}}^n$  dissipée au cours d'un cycle  $n$  est définie comme :

$$W_{\text{tot}}^n = \int_{\text{cycle}} \Delta W_{\text{tot}} \quad (2.2)$$

Elle représente l'aire totale de la boucle d'hystérésis contrainte-déformation plastique. En définissant l'énergie dissipée au cours d'un cycle  $n$  pendant les phases de charge  $W_{\text{charge}}^n$  (aire rouge en Figure 2.15) et l'énergie dissipée pendant les phases de maintien  $W_{\text{maintien}}^n$  (aire verte en Figure 2.15), on peut décomposer  $W_{\text{tot}}^n$  :

$$W_{\text{tot}}^n = W_{\text{maintien}}^n + W_{\text{charge}}^n \quad (2.3)$$

### 2.1.6.2 Résultats & discussion

Les évolutions contrainte-déformation pour les quatre microstructures génériques sont présentées Figure 2.16. Les boucles sont ouvertes pour toutes les microstructures avec des formes variées.

Pour les microstructures presque- $\gamma$  et duplex, les phases de maintien entraînent une déformation plastique significative (évolution de la déformation à 300 MPa), alors que le comportement est globalement élastique (même si pas totalement linéaire) pendant les phases de charge/décharge. On remarque aussi une différence entre les parties gauche et droite des boucles d'hystérésis. Sur la partie gauche (transition compression vers traction), les boucles sont quasiment toutes superposées, contrairement aux courbes de la partie droite (transition traction vers compression). Les boucles sont dissymétriques.

Pour les microstructures presque-lamellaire et totalement-lamellaire, les phases de maintien entraînent peu de plasticité. Par contre, les phases de charge/décharge entraînent de la déformation plastique (i.e. le comportement n'est pas linéaire, les boucles sont courbes).

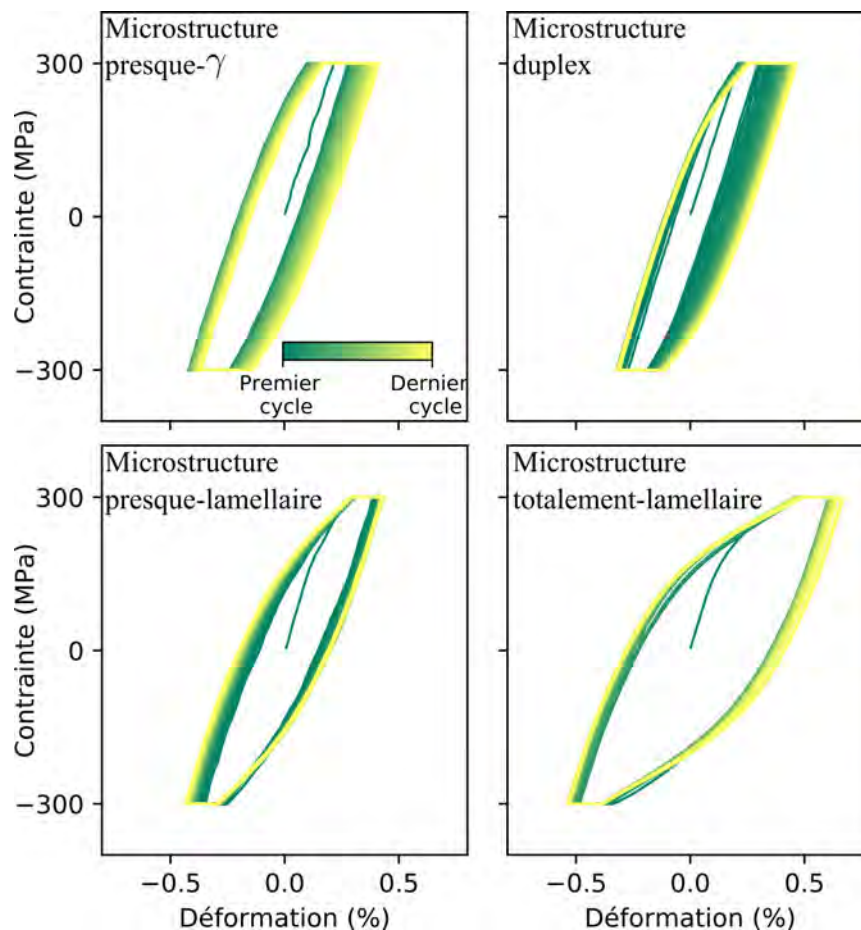


FIGURE 2.16 – Résultats des essais de fatigue-temps de maintien pour les quatre microstructures génériques des alliages TiAl.

L'évolution des énergies en fonction du nombre de cycles est présentée en Figure 2.17. On s'intéresse d'abord à l'énergie totale  $W_{tot}^n$ . Pour la microstructure totalement-lamellaire, l'énergie totale est bien supérieure à celle des autres microstructures. Les boucles d'hystérésis correspondantes en Figure 2.16 sont en effet beaucoup plus ouvertes pour la microstructure totalement-lamellaire. En ce qui concerne les microstructures presque- $\gamma$ , duplex et presque-lamellaire, on

remarque que les  $W_{tot}^n$  tendent à converger vers la même valeur. Dans le cas de microstructure presque-lamellaire,  $W_{tot}^n$  évolue peu, alors que pour les microstructures duplex et presque- $\gamma$ ,  $W_{tot}^n$  évolue de façon très importante au cours des premiers cycles.

En regardant maintenant les évolutions des énergies dissipées au cours des phases de charge  $W_{charge}^n$ , on observe que ce sont les microstructures totalement-lamellaire puis presque-lamellaire qui dissipent le plus d'énergie. La contrainte appliquée  $\sigma_{ap} = 300$  MPa est en effet supérieure à leurs limites d'élasticité  $\sigma_0$ , alors qu'elle est inférieure aux  $\sigma_0$  des microstructures presque- $\gamma$  et duplex.

Pour finir, on s'intéresse maintenant à l'évolution de l'énergie associée à la phase de maintien  $W_{maintien}^n$ . L'ordre des microstructures est modifié : la microstructure presque- $\gamma$  dissipe le plus d'énergie, suivie de la microstructure duplex, totalement-lamellaire puis presque-lamellaire. Pour les microstructures presque- $\gamma$  et duplex, bien que  $\sigma_{ap} < \sigma_0$ , l'énergie dissipée est importante à cause de la présence de leur teneur élevée en grains  $\gamma$ .

Sur la base des différentes observations, une microstructure optimisée vis-à-vis du chargement étudié peut être définie. Les microstructures presque- $\gamma$  et duplex dissipent trop d'énergie  $W_{maintien}^n$ . Surtout, leur comportement est instable :  $W_{tot}^n$  évolue significativement au cours de l'essai (au cours du premier cycle pour la microstructure presque- $\gamma$ ). À cela s'ajoute leur adoucissement transitoire (caractérisé précédemment) extrêmement important qui peut entraîner une perte de propriétés rapide en présence de plastification. Quant à la microstructure totalement-lamellaire, celle-ci dissipe une énergie totale  $W_{tot}^n$  trop importante pour la contrainte appliquée. En conclusion, sur la base de ces essais, la microstructure presque-lamellaire présente le meilleur compromis entre les phases de charge et les phases de maintien.

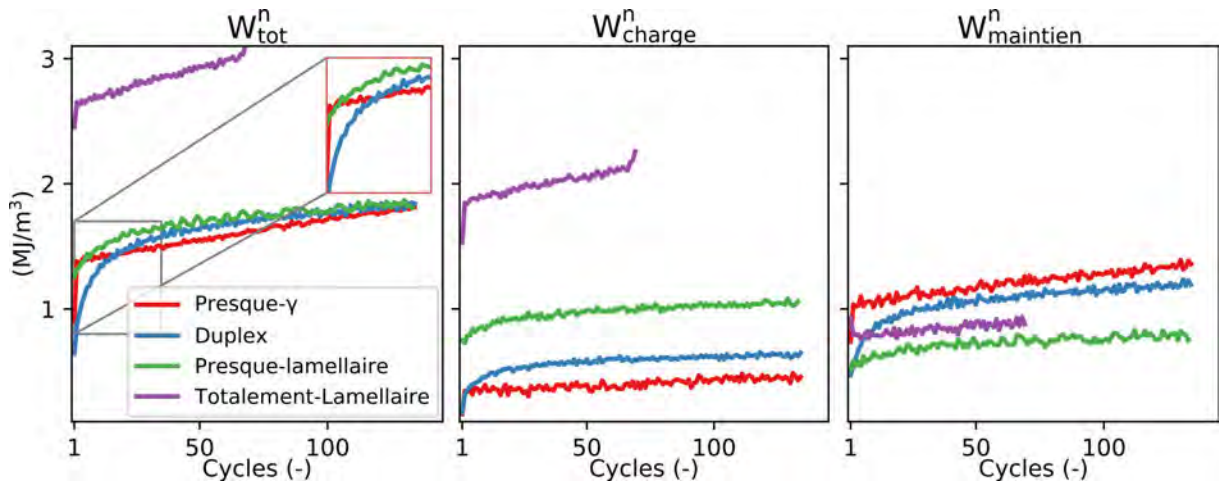


FIGURE 2.17 – Évolution de l'énergie dissipée par cycle en fonction du nombre de cycles au cours des essais de fatigue-temps de maintien.

### 2.1.7 Résumé intermédiaire des principaux résultats

Les comportements mécaniques élasto-visco-plastiques des quatre microstructures génériques des alliages TiAl ont été étudiés à 20 °C et 750 °C avec une vision macroscopique (i.e. en analysant la réponse contrainte-déformation) pour des chargements monotones et cycliques.

- Il n'y a pas de durcissement ni d'adoucissement cyclique à 750 °C, le cycle stabilisé est atteint immédiatement.
- Les microstructures à forte teneur en grains  $\gamma$  présentent un adoucissement transitoire important et sont sensibles aux effets de vitesse. Leur transition élasto-plastique est très

marquée.

- Les microstructures à forte teneur en colonies lamellaires présentent un écrouissage cinématique important et sont peu sensibles aux effets de vitesse. On suspecte que l'anisotropie plastique des colonies lamellaires entraîne une activation séquentielle de la plasticité.
- L'analyse d'essais de fatigue-temps de maintien démontre que la microstructure presque-lamellaire présente le meilleur compromis entre les phases de chargement et les phases de maintien.

## 2.2 Échelle mésoscopique : étude de la localisation de la déformation dans les microstructures des alliages TiAl

Bien que l'étude macroscopique proposée ci-dessus donne un certain nombre d'informations sur le lien entre microstructure et comportement mécanique, elle donne une vision moyennée des phénomènes mis en jeu. Notamment, dans le cas des alliages TiAl, les comportements locaux des grains  $\gamma$  et des colonies lamellaires sont très différents. Il est alors intéressant d'étudier le comportement à une échelle intermédiaire, l'échelle mésoscopique.

L'objectif de cette section est de réaliser des essais dits micromécaniques afin d'étudier la localisation de la déformation dans la microstructure et la mettre au regard des observations macroscopiques. On s'intéresse au cas des deux microstructures opposées en terme de comportement, la microstructure presque- $\gamma$  et la microstructure totalement-lamellaire. De cette façon, les comportements des grains  $\gamma$  et des colonies lamellaires sont isolées.

Les longueurs caractéristiques associées à ces microstructures étant différentes, elles nécessitent l'emploi de moyens expérimentaux différents. Pour la microstructure presque- $\gamma$ , des essais *in situ* dans un Microscope Électronique à Balayage (MEB) sont réalisés. Pour la microstructure totalement-lamellaire, les essais sont réalisés sous moyens optiques.

### 2.2.1 Moyens d'essais et corrélation d'images

#### 2.2.1.1 Platine d'essais et éprouvettes

La machine d'essais micromécanique disponible à l'Onera est présentée en Figure 2.18. Cette machine a été conçue pour tenir dans la chambre et sur la platine d'un Microscope Electronique à Balayage (MEB). L'effort maximal applicable est de 2 kN.

Les éprouvettes utilisées doivent être plates. Un schéma de la géométrie d'éprouvette utilisée est présenté en Figure 2.18, le plan avec les cotations est donné en annexe A. Les éprouvettes ont une épaisseur de 1 mm. Elles sont maintenues sur la platine par des mors de serrage. Des trous doivent être usinés dans les têtes afin d'insérer les pions de guidage qui assurent l'alignement avec l'axe de sollicitation. L'usinage est réalisé en interne à l'Onera par électro-érosion. Le fil d'électro-érosion passe par les têtes pour détourner les trous, ce qui laisse une fente de l'extérieur de la tête jusqu'au trou.

Les essais sont pilotés en force. Les données classiques issues des essais sont donc le déplacement des mors et la force imposée. Les essais sont tous réalisés en traction. Lorsque l'on parle d'essais cycliques dans la suite de cette partie, il s'agit d'essais charge-décharge soit un rapport de charge  $R_F = 0$ .

#### 2.2.1.2 Corrélation d'images

La corrélation d'images numériques 2D consiste à mesurer le champ de déplacement à la surface d'une éprouvette à partir de d'images acquises à deux instants différents du chargement [Hild, 2004]. Un schéma est présenté en Figure 2.19. Le principe de la corrélation consiste à

appairer le motif correspondant à la zone d'étude sur les deux images afin de pouvoir déterminer le déplacement du centre de la zone. Son application suppose la conservation des niveaux de gris entre deux images acquises successivement.

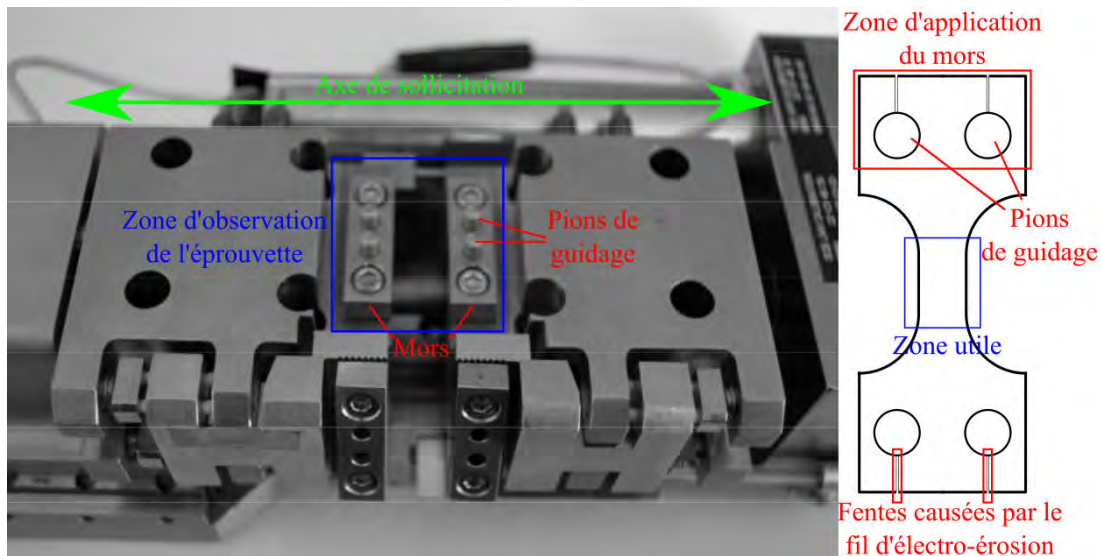


FIGURE 2.18 – Moyen d'essais micromécaniques. À gauche, photographie de la machine d'essais micromécanique. À droite, schéma des éprouvettes utilisées.

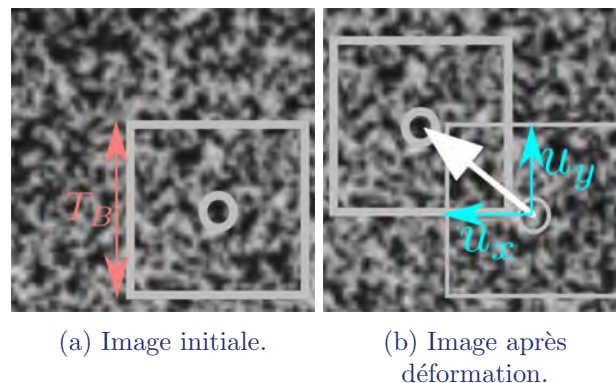


FIGURE 2.19 – Principe de la corrélation d'images : zone d'étude sur une image de référence et sur une image après déformation [Hild, 2004]. La taille de la boîte est définie par  $T_B$ . Les flèches représentent le vecteur du champ de déplacement et ses composantes  $u_x$  et  $u_y$  mesurés par corrélation pour le point au centre de la boîte de corrélation.

Un motif appelé mouchetis doit être appliqué sur la surface de l'échantillon afin de distinguer les différentes zones d'intérêt. Il doit être adapté à la taille de la zone étudiée et au moyen d'acquisition des images. Sur la Figure 2.19, le mouchetis est formé par les taches noires et blanches.

La corrélation d'images est réalisée avec la plateforme de dialogue essais/calculs *escale* développée à l'Onera [Garaud et al., 2017]. Les corrélations sont toutes effectuées avec l'algorithme FOLKI-D développé à l'Onera qui donne un résultat dense, c'est-à-dire une estimation du déplacement en chaque pixel de l'image [Le Besnerais et al., 2016]. Dans tous les résultats présentés, l'axe de sollicitation est l'axe horizontal de l'image. Le paramètre principal pour la corrélation d'images est la taille de subset, ou taille de boîte  $T_B$  (i.e. de la zone d'étude en Figure 2.19).

La déformation  $\varepsilon_{ij}$  est un gradient du déplacement, elle est calculée sur une zone plus grande que la taille de boîte  $T_\varepsilon = 2T_B + 1$ . Les déformations selon l'axe horizontal des images  $\varepsilon_{xx}$ , selon l'axe vertical  $\varepsilon_{yy}$ , et le cisaillement dans le plan  $\varepsilon_{xy}$  sont calculés à partir des déplacements correspondant  $u_x$  et  $u_y$  par FOLKI-D tel que :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} \quad ; \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} \quad ; \quad \varepsilon_{xy} = \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) / 2 \quad (2.4)$$

## 2.2.2 Étude de la localisation de la déformation dans une microstructure presque- $\gamma$ : essai *in situ* MEB

On s'intéresse à la localisation de la déformation dans la microstructure presque- $\gamma$  de l'alliage G4, étudié avec une vision macroscopique dans la section précédente (section 2.1). Les caractéristiques de la microstructure et de son comportement sont rappelées en Figure 2.20. La ductilité étant très limitée, l'essai a pour objectif l'étude de la transition élasto-plastique. On cherche notamment à déterminer si l'on observe de la plasticité localement avant l'apparition de la bosse sur la contrainte de la réponse contrainte-déformation.

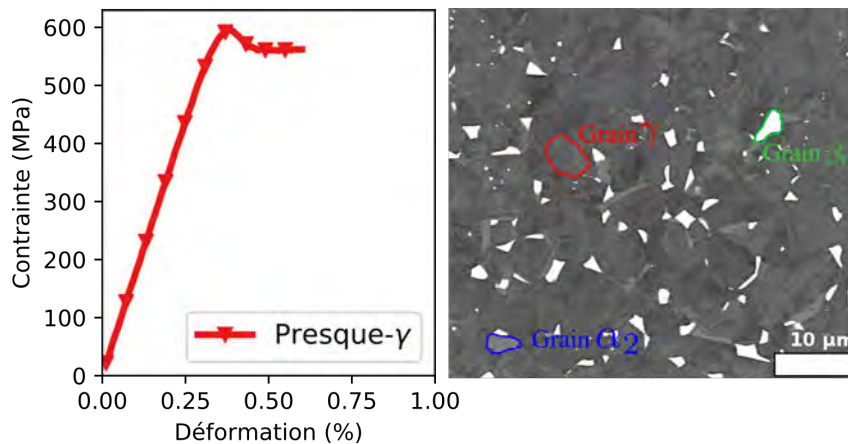


FIGURE 2.20 – Rappel des caractéristiques de la microstructure presque- $\gamma$  étudiée en section 2.1 avec les résultats d'un essai de traction et une micrographie MEB de la microstructure.

Les grains étant petits ( $< 10 \mu\text{m}$ ), les essais doivent être réalisés *in situ* MEB. Sachant que l'on souhaite mesurer la déformation dans les grains, un mouchetis de taille nanométrique doit être déposé sur la surface de l'échantillon.

### 2.2.2.1 Mouchetis et conditions d'acquisition

Le laboratoire de microscopie de l'Onera a développé un mouchetis à base de dépôt d'or adapté à la mesure de déformation à l'échelle du micromètre [Mahouas, 2016, Donin de Rosière, 2019]. Un film d'or de très faible épaisseur est déposé à la surface polie d'un échantillon par vaporisation d'un filament. Un traitement thermique de 4 h à  $450 \text{ }^\circ\text{C}$  sous vide est ensuite appliqué pour faire démouiller l'or qui vient former des particules sphériques à la surface de l'échantillon. On retrouve ce type de mouchetis ailleurs dans la littérature [Di Gioacchino and Da Fonseca, 2013, Edwards et al., 2017, Guery et al., 2013].

Une micrographie MEB du mouchetis est présentée en Figure 2.21. Les tâches blanches correspondent au dépôt d'or, et le fond sombre au matériau de base. Le mouchetis est extrêmement fin, avec des tailles de particules d'environ 30 nm. Des oscillations sur l'image causées par le

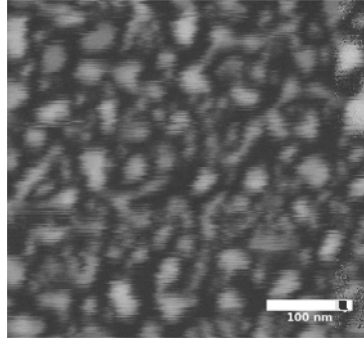


FIGURE 2.21 – Micrographie en électrons rétrodiffusés du mouchetis or. On note que le mouchetis est tellement fin que l'on observe des stries de balayage : la résolution maximale du microscope est atteinte.

balayage du faisceaux d'électrons du microscope sont observées car la résolution maximale du microscope est atteinte. Sur l'image, 1 particule est formée en moyenne par 3 pixels. La taille de la boîte de corrélation est alors choisie telle que  $T_B = 25$  pixels, ce qui permet de s'assurer qu'au moins 3 particules soient repérées dans chaque boîte. La résolution pour la déformation est donc de  $T_\varepsilon = 2T_B + 1 = 51$  pixels  $\approx 459$  nm.

L'acquisition d'images au MEB entraîne une distorsion causée par le balayage du faisceau d'électrons. Deux acquisitions successives d'une même zone ne donnent pas exactement le même résultat. Une étude préliminaire présentée en [annexe A](#) a permis de quantifier l'erreur de mesure introduite. Les déformations liées aux instabilités de balayage sont inférieures à 1 % : seules des déformations locales supérieures à 1 % peuvent donc être discutées avec le mouchetis utilisé. Cette étude préliminaire a permis de s'assurer que des champs de déplacement de l'ordre du nanomètre peuvent être mesurés via la réalisation d'essais mécaniques *in situ* MEB.

### 2.2.2.2 Analyse de la déformation dans les microstructures presque- $\gamma$

Un essai est réalisé sur une éprouvette de microstructure presque- $\gamma$ , polie au papier abrasif jusqu'à  $0,25 \mu\text{m}$ , puis marquée en surface par indentation afin d'identifier différentes zones d'étude (triangles sur la [Figure 2.22](#)). L'éprouvette est ensuite passée au poli vibrant pendant plusieurs heures afin d'obtenir un état de surface permettant la réalisation de cartographies EBSD.

Des cartographies EBSD sont réalisées sur trois zones étudiées au long de l'essai. La taille de ces cartographies est d'environ  $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ . Le mouchetis a ensuite été déposé suivant le protocole défini ci-dessus, l'éprouvette montée sur la platine, puis introduite dans la chambre du MEB.

Dans les trois zones cartographiées par EBSD, des zones de  $28 \mu\text{m} \times 28 \mu\text{m}$  sont repérées et des micrographies sont réalisées. Nous verrons par la suite que disposer de cartographies EBSD plus grandes que la zone où la corrélation d'images est réalisée présente un intérêt pour la partie modélisation du travail ([chapitre 4](#)).

Le chargement par palier appliqué est présenté en [Figure 2.23a](#). À chaque décharge, des micrographies des trois zones d'étude sont réalisées. En procédant ainsi par palier, on cherche à déterminer le seuil pour lequel de la déformation plastique est observée localement.

L'évolution de la force appliquée en fonction de la distance entre les mors est présentée en [Figure 2.23b](#). La distance entre les mors augmente de façon significative à  $1250 \text{ N}$ , ce qui peut indiquer l'apparition de la déformation plastique. Néanmoins, aucune trace de déformation n'est repérée dans les zones d'étude, et l'éprouvette a rompu au palier suivant. La rupture semble avoir



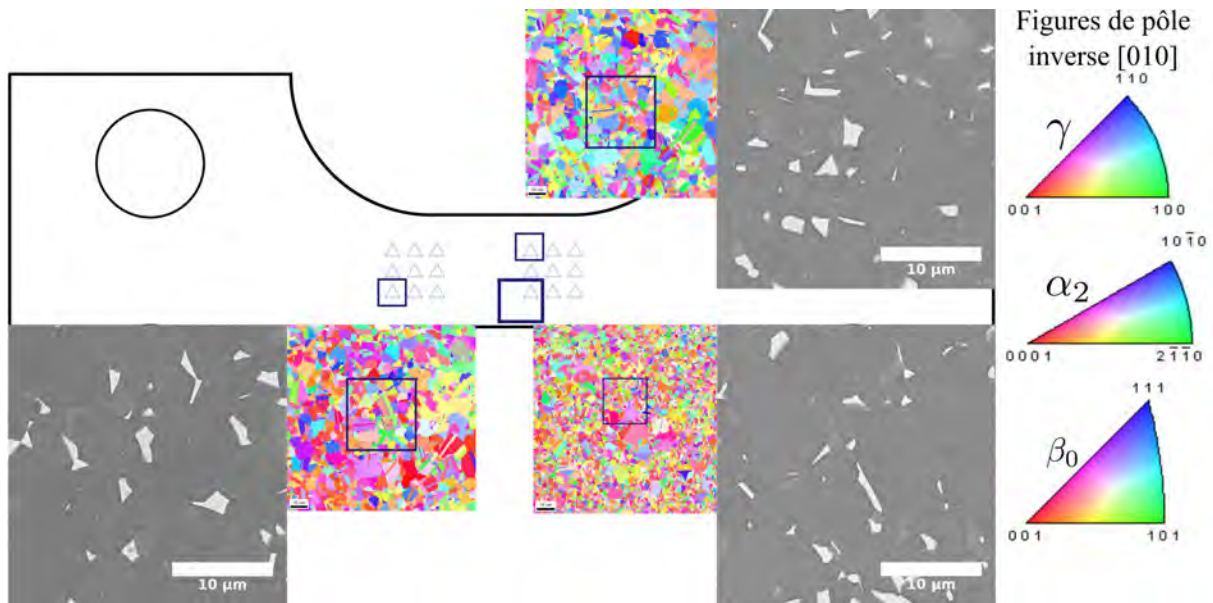
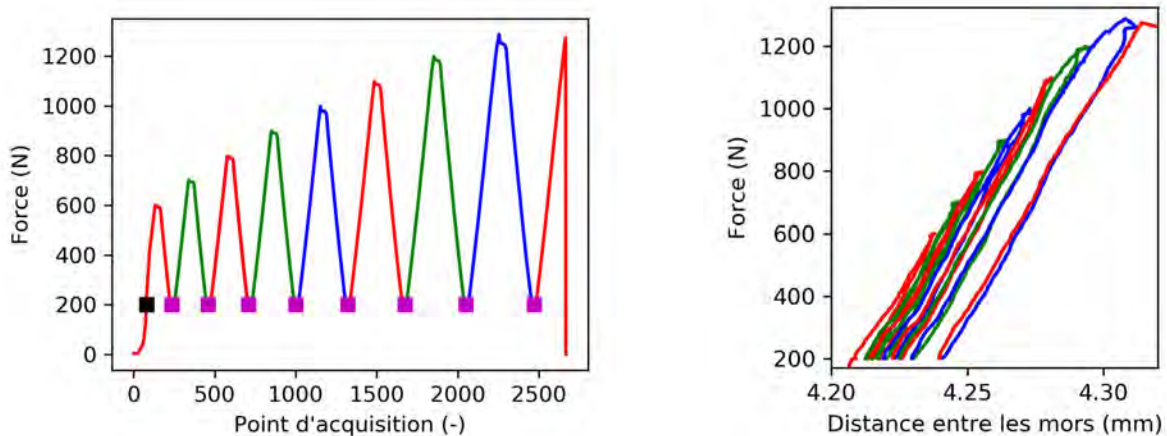


FIGURE 2.22 – Schéma représentant l’essai micromécanique *in situ* MEB réalisé sur la microstructure presque- $\gamma$ . Les triangles représentent les marquages par indentation. Les micrographies MEB ( $28\ \mu\text{m} \times 28\ \mu\text{m}$ ) sont celles des zones étudiées à chaque chargement.

été immédiate car l’évolution du chargement en fonction de la distance entre les mors n’indique pas de mécanisme de propagation de fissure longue.

Ce résultat partiel plaide en faveur d’une transition-élasto plastique soudaine. Il semble qu’à partir d’une contrainte seuil (haut de la bosse), le matériau se déforme plastiquement soudainement, et de façon significative. Cela appuie le scénario établi dans la section précédente (section 2.1) et rejoint des observations de la littérature (voir l’étude bibliographique du chapitre 1). Par exemple, [Jiang et al., 2009] ont réalisé un essai *in situ* MEB sur une microstructure duplex, dont le comportement est similaire à celui des microstructures presque- $\gamma$ . Ils n’ont observé de la déformation plastique locale qu’à partir d’une contrainte critique.



(a) Force en fonction du point d’acquisition. L’image de référence pour la corrélation correspond au carré noir. Les autres carrés correspondent aux points d’acquisition d’images au cours de l’essai.

(b) Force en fonction de la distance entre les mors.

FIGURE 2.23 – Chargement appliqué à l’éprouvette presque- $\gamma$ .

### 2.2.3 Étude de la déformation dans une microstructure totalement-lamellaire : essais sous moyens optiques

On souhaite étudier la localisation de la déformation plastique dans une microstructure totalement-lamellaire. La matière utilisée en section 2.1 n'étant plus disponible, une solution alternative a dû être trouvée.

Si l'étude de différents alliages entraîne nécessairement des différences en terme de niveau de contrainte, l'étude bibliographique montre que pour une microstructure générique donnée, les comportements et phénomènes observés sont similaires (voir chapitre 1). Alors, bien que la microstructure totalement-lamellaire étudiée ici provienne d'un alliage différent, les observations réalisées ici et l'analyse du comportement local sont valables pour toutes les microstructures lamellaires.

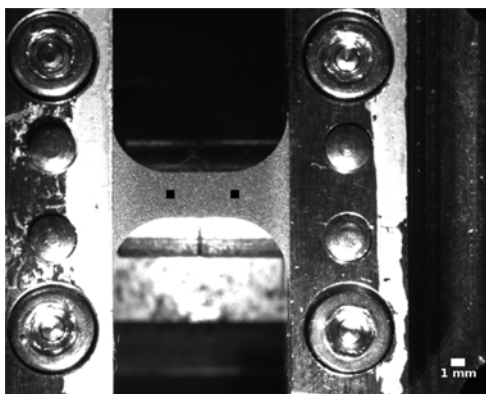
L'alliage utilisé dans cette partie de l'étude est donc l'alliage GE (Ti-48Al-2Nb-2Cr) issu de fonderie et présentant une microstructure totalement-lamellaire avec de grandes colonies. Leur diamètre équivalent moyen est en effet  $\langle D_{eq} \rangle \approx 350 \mu\text{m}$ . Les éprouvettes sont usinées en interne à l'Onera comme indiqué précédemment.

Du fait de la taille des colonies, on propose de réaliser les essais sous moyens optiques. Les essais réalisés ici se démarquent donc de ceux de la littérature par la taille du champ observé, et donc par le nombre de colonies lamellaires étudiées simultanément.

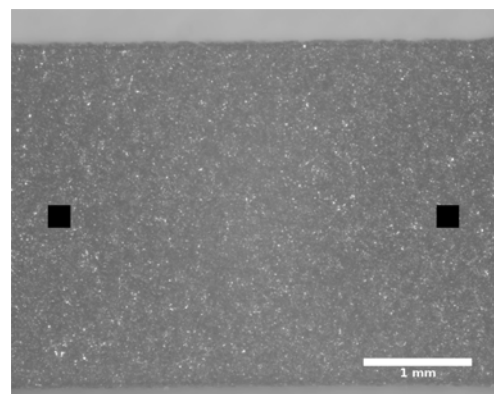
Dans un premier temps, les techniques expérimentales utilisées sont détaillées via la présentation d'essais qui ont permis de caractériser le comportement de l'alliage. Dans un second temps, les résultats d'un essai de traction et d'un essai cyclique permettant d'analyser la déformation dans les microstructures lamellaires sont présentés.

#### 2.2.3.1 Moyens d'acquisition & caractérisation du comportement mécanique

Les essais sont réalisés sous une caméra d'une résolution 2752 pixels selon l'axe horizontal et 2206 pixels selon l'axe vertical. Deux objectifs différents sont utilisés pour les essais de caractérisation du comportement : un de  $32,6 \times 24,4 \text{ mm}$  donnant une vue d'ensemble de l'éprouvette, et un de  $4,2 \times 3,6 \text{ mm}$  permettant d'étudier uniquement le fût de celle-ci. Deux exemples d'images acquises avec les différents objectifs sont présentés en Figure 2.24a et Figure 2.24b.



(a) Champ  $32,6 \times 24,4 \text{ mm}$ .



(b) Champ  $4,2 \times 3,6 \text{ mm}$ .

FIGURE 2.24 – Exemples d'images utilisées pour les corrélations d'images acquises avec deux objectifs différents. L'état de surface post-usinage que l'on observe ici présente des niveaux de gris suffisant pour la réalisation de corrélations d'images (le contraste est modifié dans le manuscrit par la compression des images). La position de l'extensomètre virtuel est indiquée par les carrés noirs sur les deux images.

Une série d'essais est d'abord réalisée sous l'objectif à grand champ afin d'avoir une vision d'ensemble du fût de l'éprouvette et voir l'apparition d'éventuelles bandes de localisation. Par la suite, tous les essais sont réalisés sous l'objectif à petit champ pour étudier localement l'origine de ces bandes de localisation.

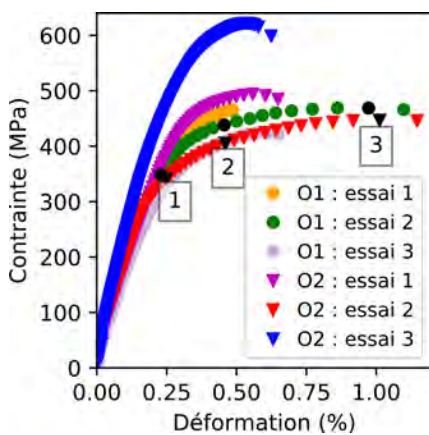
Grâce à l'acquisition d'images en continu, il est possible de mesurer une déformation macroscopique tout au long de l'essai à partir des résultats de la corrélation d'images via la définition d'un extensomètre virtuel. Les carrés noirs en Figure 2.24 représentent les positions de l'extensomètre virtuel. Les déplacements obtenus par corrélation d'images  $y$  sont moyennés, puis la distance  $l$  entre les deux centres des carrés mesurée. La déformation est alors calculée telle que  $\varepsilon = (l - l_0)/l_0$ , avec  $l_0$  la distance initiale entre les carrés.

Une étude de sensibilité de la mesure par extensométrie virtuelle vis-à-vis de la taille et de la hauteur des carrés a été conduite. L'utilisation de carrés de côté supérieur à 30 pixels permet d'obtenir des résultats indépendants de ces paramètres.

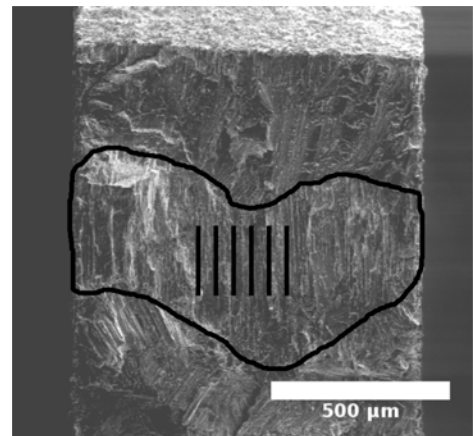
Le comportement peut alors être analysé avec des courbes contrainte-déformation macroscopiques en calculant la contrainte dans la zone utile  $\sigma = F/S$  avec  $F$  la force appliquée et  $S$  la section de la zone utile. On obtient donc un état contrainte-déformation macroscopique, qui peut être relié à un champ de déformation local dans la microstructure.

Les éprouvettes sont sollicitées en traction. Sous caméra, l'état de surface post-usinage présente une variation de niveau de gris suffisante pour la réalisation de corrélations d'images numériques. À ce stade, l'idée est de caractériser le comportement mécanique de l'alliage sans étudier la répartition de la déformation dans la microstructure. En conséquence, aucun mou-chetis n'est appliqué pour l'instant : l'état de surface post-usinage sert de marqueur pour les corrélations d'images.

Les courbes contrainte-déformation obtenues pour six éprouvettes sont présentées en Figure 2.25. Trois essais ont été réalisés sous l'objectif à grand champ (Figure 2.24a), et trois sous l'objectif à petit champ (Figure 2.24b).



(a) Évolution de la contrainte en fonction de la déformation (mesurée par extensomètre virtuel) de six éprouvettes. Les indices O1 et O2 indiquent l'utilisation de l'objectif à grand champ (Figure 2.24a) et à petit champ (Figure 2.24b).



(b) Exemple de fractographie réalisée au MEB). On observe parfois une seule grande colonie dans la section de l'éprouvette, comme celle entourée ici dont les lamelles sont parallèles à l'axe de sollicitation (qui est normal à l'image).

FIGURE 2.25 – Résultat de la caractérisation du comportement de la microstructure totalement-lamellaire de l'alliage GE par la réalisation d'essais micromécaniques.

Une dispersion significative du comportement mécanique est observée. Cette dispersion n'est

pas corrélée à l'utilisation de deux objectifs distincts. L'observation des faciès de rupture donne une première explication à son origine. Un exemple de fractographie réalisée au MEB est présenté en Figure 2.25b. Sur cette image, la section de l'éprouvette ne contient localement qu'une seule colonie lamellaire. De fait, on ne sollicite parfois pas un Volume Élémentaire Représentatif (i.e. une volume qui contient assez de colonies). Il suffit alors que des colonies soient orientées spécifiquement vis-à-vis de l'axe de chargement dans certaines éprouvettes pour caractériser involontairement l'anisotropie plastique des colonies lamellaires (voir chapitre 1).

Une première analyse de la localisation de la déformation avant la rupture permet de compléter les résultats. Une façon pratique de la visualiser est de calculer une grandeur scalaire à partir des trois composantes de la déformation  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$  et  $\varepsilon_{xy}$ . On utilise la définition proposée dans [Di Gioacchino and Da Fonseca, 2013] qui part du principe que la déformation dans les métaux s'effectue par cisaillement à l'échelle atomique avec :

$$\varepsilon_{xy(max)} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}}{2}\right)^2 + \varepsilon_{xy}^2} \quad (2.5)$$

Les cartes des déformation  $\varepsilon_{xy(max)}$  de deux essais, chacun avec une vue différente de l'éprouvette, sont présentées en Figure 2.26. Les noms d'essais et les numérotations correspondent aux noms et aux points indiqués en Figure 2.25a. On rappelle qu'à ce stade, la microstructure n'est pas visible car l'état de surface post-usinage est utilisé comme marqueur pour les corrélations d'images.

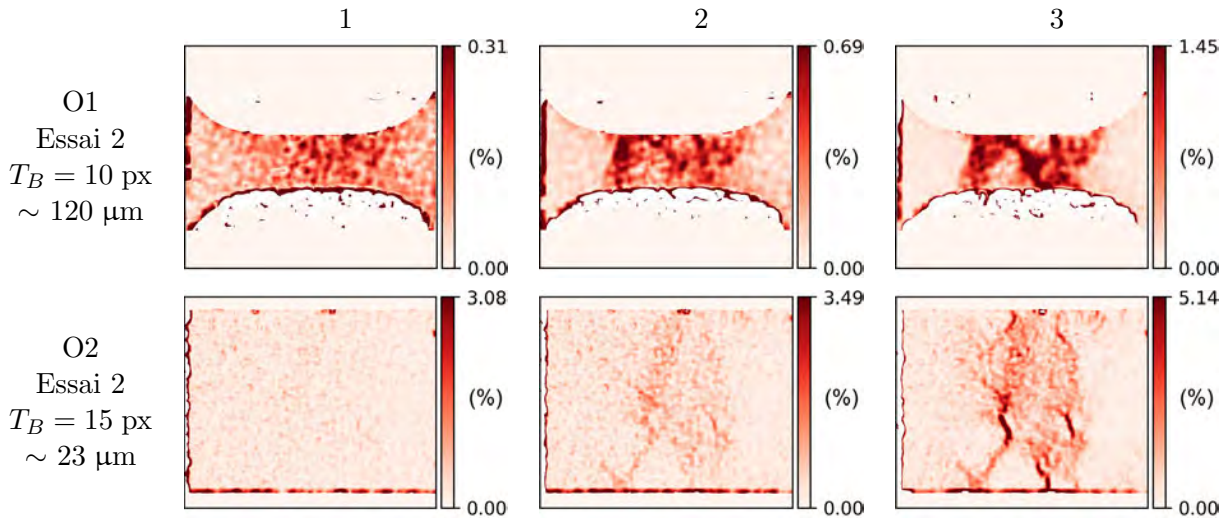


FIGURE 2.26 – Cartes des déformations  $\varepsilon_{xy(max)}$  calculées à partir des résultats des corrélations d'images aux instants de chargement indiqués en Figure 2.25a.

Pour l'essai réalisé avec le grand champ, des bandes de localisations parcourant la zone utile sont observées. Certaines bandes sont situées proches des congés de l'éprouvette. Alors, une colonie mal orientée située en sortie de congé peut entraîner une rupture prématurée.

Pour l'essai réalisé avec l'objectif à petit champ, on observe localement les origines des bandes de localisation. Il semble que les premières zones de localisation de la déformation apparaissent au bord et au cœur de l'éprouvette (carte 2) et semblent orientées à environ  $45^\circ$  vis-à-vis de l'axe de sollicitation. Ces observations doivent maintenant être mises en lien avec la microstructure sous-jacente.

### 2.2.3.2 Analyse de la déformation dans les microstructures totalement-lamellaires

Deux éprouvettes sont polies au papier abrasif jusqu'à  $0,25\ \mu\text{m}$ . Leurs zones utiles sont ensuite caractérisées au MEB. Une mosaïque d'images est réalisée puis assemblée pour reconstruire l'ensemble de la zone utile de l'éprouvette. Un exemple complet permettant de se rendre compte des dimensions est présenté Figure 2.27.

Le contraste ne permettant pas l'utilisation des techniques d'analyse d'images classiques généralement utilisées pour mesurer la taille des grains, les colonies sont détournées manuellement. On parvient en effet à les distinguer grâce à l'orientation apparente de leur plan d'interface lamellaire. L'orientation apparente des colonies vis-à-vis de l'axe de chargement est mesurée.

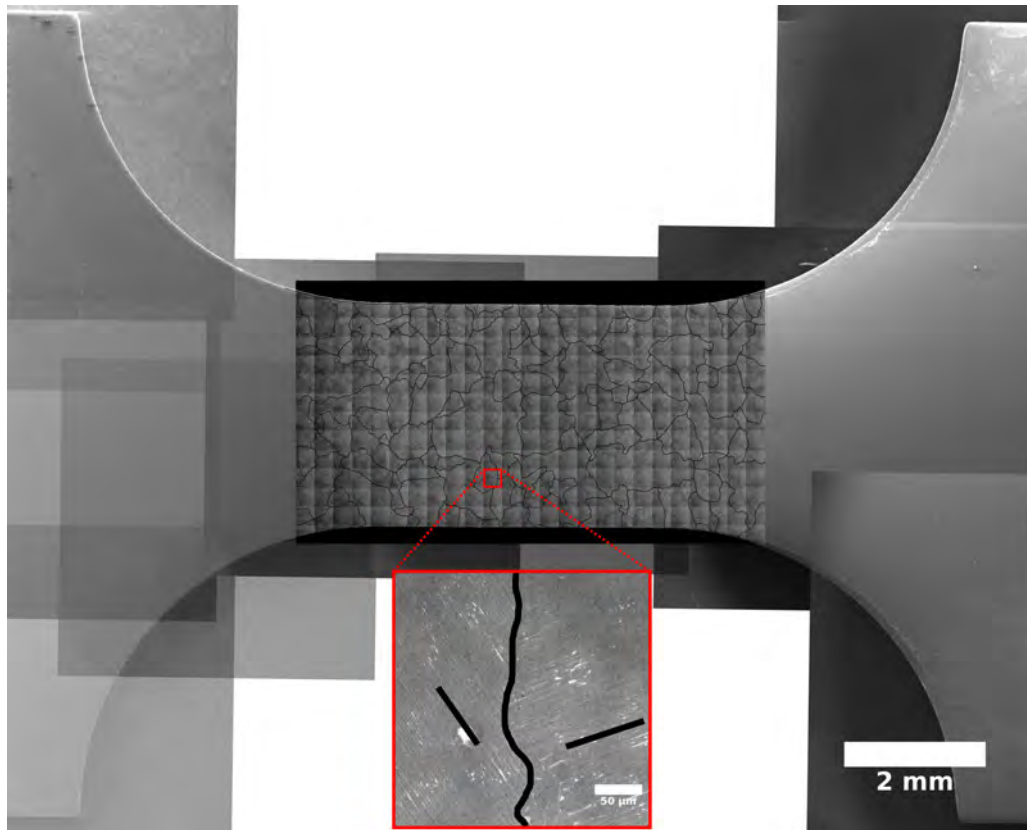


FIGURE 2.27 – Exemple d'une caractérisation du fût d'une éprouvette micromécanique par assemblage d'images acquises au MEB. On note que le contraste ne permet pas de distinguer les colonies avec les méthodes d'analyse d'images classiques. Celles-ci sont donc détournées manuellement. Le zoom permet d'observer comment les colonies sont détournées : les plans apparents d'interface lamellaire (trait noir) des colonies adjacentes sont différents.

Dans un second temps, un mouchetis à la peinture est réalisé à l'aide d'un aérographe. Un exemple est présenté en Figure 2.28. La zone utile est d'abord recouverte de peinture blanche, puis aspergée de brefs sprays de peinture noire. Le processus est répété jusqu'à l'obtention d'un histogramme de niveaux de gris satisfaisant.

Une fois le mouchetis déposé, l'éprouvette est montée délicatement sur la platine, puis placée sous la caméra. L'essai est alors réalisé. Un extensomètre virtuel est utilisé pour mesurer la déformation à partir des résultats de la corrélation d'images (carrés noirs en Figure 2.28). Pour les cartographies de déformation, la taille de la boîte de corrélation est  $T_B = 7\ \text{pixels} \approx 11\ \mu\text{m}$ , et la résolution pour la déformation  $T_\varepsilon = 2T_B + 1 \approx 23\ \mu\text{m}$ .

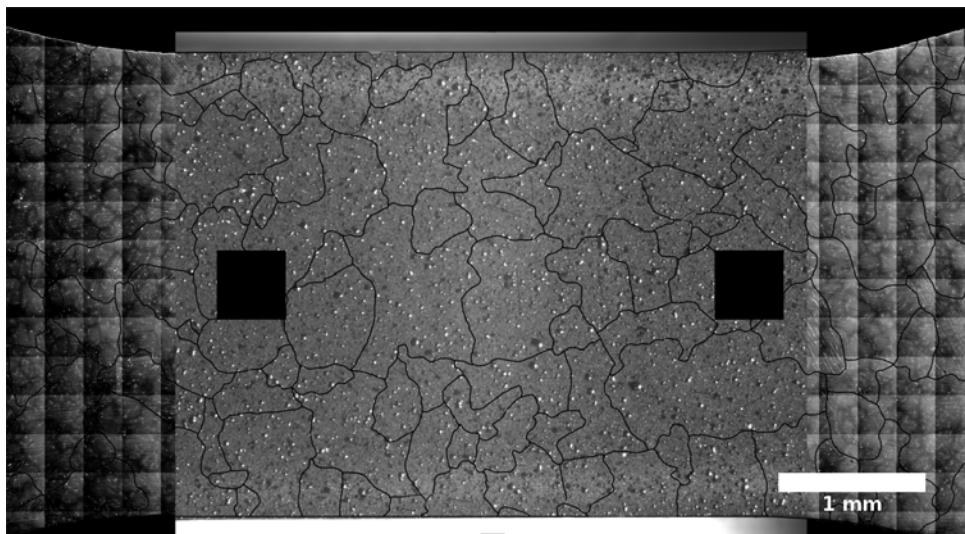


FIGURE 2.28 – Exemple de mouchetis réalisé à l’aérographe observé sous la caméra. Les carrés noirs indiquent la position des zones utilisées pour mesurer la déformation via l’utilisation d’un extensomètre virtuel.

### Essai de traction

Les résultats de l’essai sont présentés en Figure 2.29. L’axe de sollicitation est horizontal vis-à-vis des images présentées.

On s’intéresse d’abord à la courbe contrainte-déformation obtenue grâce à l’extensomètre virtuel. Entre les instants T4 et T5, une chute de la contrainte suivie de grands sauts de déformation est observée. Ce comportement reflète souvent un mécanisme de propagation de fissure longue au niveau local. L’étude des cartes des déformations  $\varepsilon_{xy(max)}$  associées aux différents instants permet d’associer l’état macroscopique à la déformation dans la microstructure.

Au début du chargement (T1), la déformation est globalement homogène, mais l’on repère quelques zones où elle est légèrement supérieure (indiquées par des flèches bleues) pour des colonies avec des orientations proches de  $45^\circ$  vis-à-vis de l’axe chargement. Lorsque le chargement augmente (T2), la déformation se localise dans des zones proches des bords, mais aussi à cœur dans des colonies à  $45^\circ$ .

À l’instant d’après (T3), la courbe contrainte-déformation montre que le domaine plastique macroscopique est atteint. Localement, le niveau de déformation s’accroît dans les zones déjà activées. Alors qu’avec la vision macroscopique une déformation inférieure à 0,5 % est mesurée, la déformation mesurée localement dépasse les 1 %. Une première fissure (flèche verte) est observée à la surface de l’échantillon. Il semble que cette fissure affecte significativement le niveau de déformation mesuré dans cette zone.

Lorsque le chargement augmente encore (T4), la déformation commence à traverser l’ensemble de la zone utile en se propageant dans les colonies peu désorientées les unes par rapport aux autres.

À la fin de l’essai (T5), la déformation traverse l’éprouvette et forme une bande de localisation. Plusieurs fissures se propagent, ce qui confirme que la forme de la courbe contrainte-déformation reflète bien un mécanisme de propagation de fissure longue. On note que d’autres zones sont aussi déformées mais à des niveaux moins importants que ceux observés dans la bande.

D’après cet essai, il semble donc qu’en traction la déformation s’initie d’abord dans les colonies orientées à  $45^\circ$ . Ce sont ensuite les premières zones activées qui pilotent la rupture. La

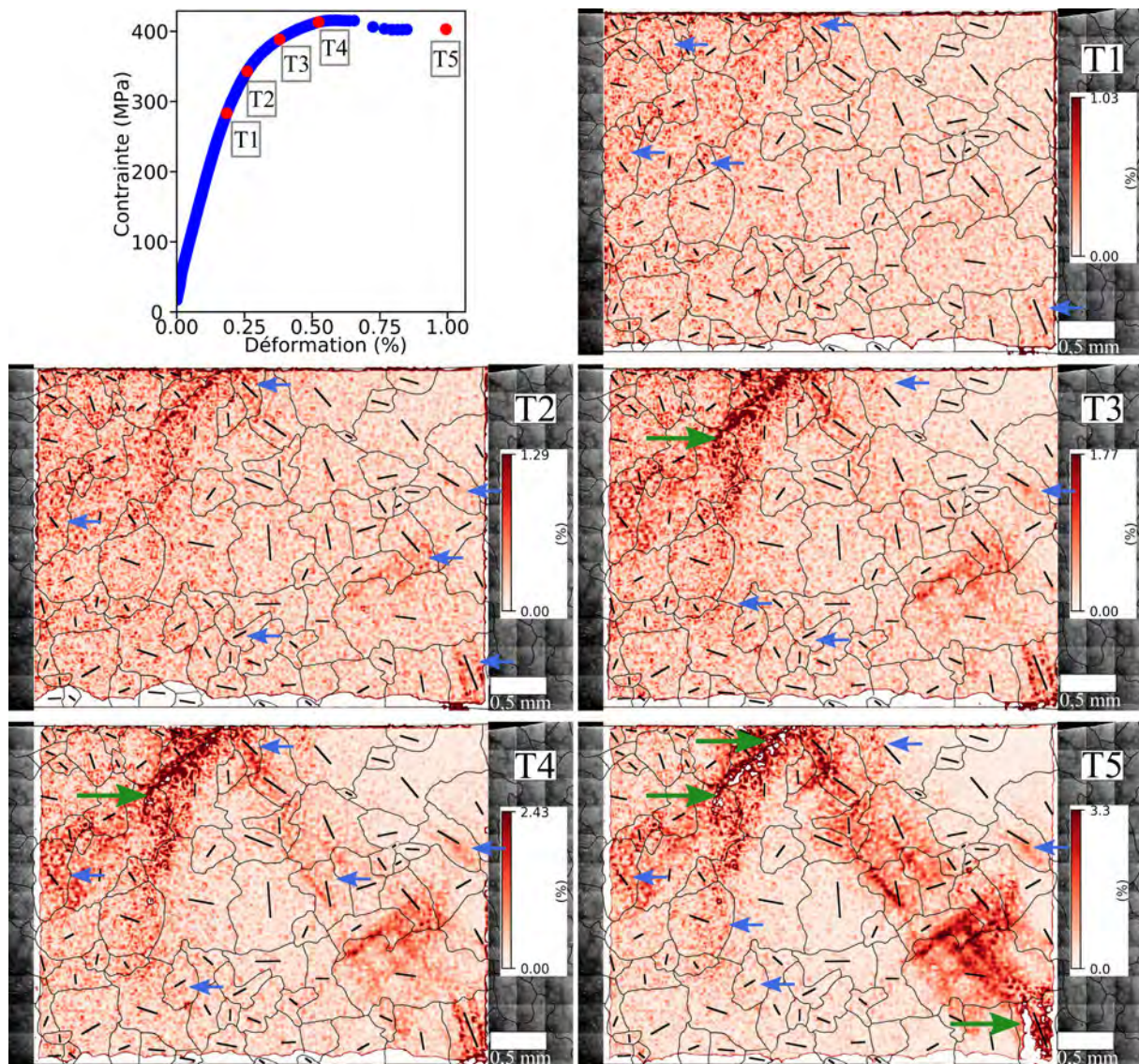


FIGURE 2.29 – Cartes des déformations  $\varepsilon_{xy(max)}$  calculées à partir des résultats des corrélations d'images aux instants de chargement indiqués sur le courbe contrainte-déformation. Les flèches vertes indiquent des fissures observées en surface. Les flèches bleues indiquent des zones de déformation discutées dans le corps du texte. Les traits noirs indiquent l'orientation du plan d'interface lamellaire apparent.

déformation s'y accentue fortement, puis se propage de part et d'autre de l'éprouvette à travers les colonies peu désorientées les unes par rapport aux autres.

### Essai cyclique

Un essai cyclique multi-niveaux charge-décharge est réalisé. Le chargement est décrit en Figure 2.30. Au premier palier de 1100 N, 15 cycles sont réalisés. L'effort est ensuite augmenté par pas de 100 N tous les 15 cycles.

Sur la courbe contrainte-déformation associée à l'essai, un effet Rochet ("ratcheting" dans la littérature anglo-saxonne) est observé. C'est-à-dire que pour un même niveau d'effort, la boucle d'hystérésis se décale du fait de l'accumulation d'une déformation plastique à chaque charge-décharge. Cet effet s'accroît lorsque la contrainte augmente.

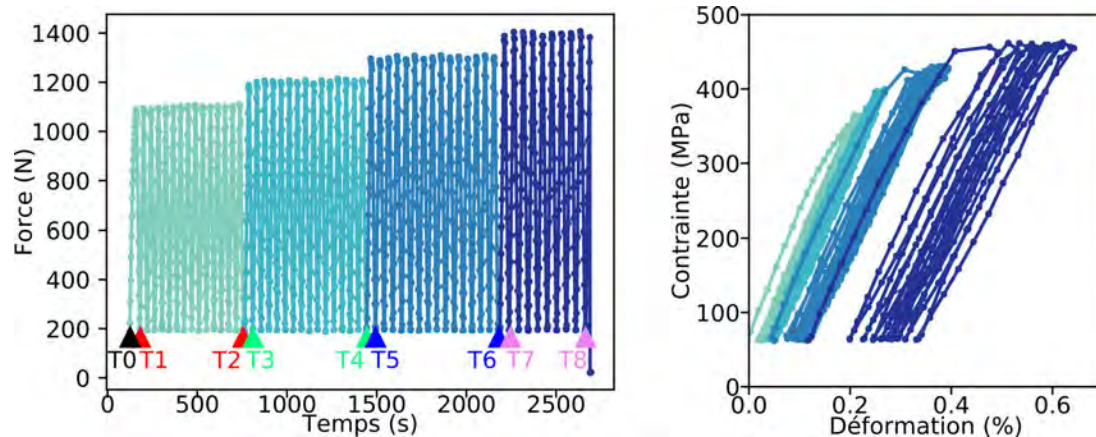


FIGURE 2.30 – Évolution de la force appliquée en fonction du temps (gauche). Les instants indiqués correspondent à la décharge du premier cycle et du dernier cycle de chaque palier de force. L'effort ne redescend pas à 0 N afin de conserver la rigidité du montage tout au long de l'essai. À droite, courbe contrainte-déformation obtenue après le traitement de l'essai.

Les cartes des déformations  $\varepsilon_{xy(max)}$  associées aux instants indiqués en Figure 2.30 sont présentées en Figure 2.31. Pour chaque palier, les cartes de la déformation à la décharge du premier cycle (images de gauche) et la décharge du dernier cycle (images de droite) sont présentées. La déformation observée est donc plastique.

Au premier palier d'effort (T1 et T2), seules les colonies orientées à  $45^\circ$  et proches du bords se déforment (flèches bleues). Les niveaux de déformation plastique observés sont déjà importants (plus de 1 %) par rapport à la déformation plastique observée à la décharge sur la courbe contrainte-déformation macroscopique (0,02 %). Localement, la déformation plastique n'évolue pas après la réalisation de 15 cycles. C'est aussi le cas d'un point de vue macroscopique, car l'effet Rochet est très limité (i.e. les boucles ne se décalent pas à chaque cycle).

Au deuxième palier (T3 et T4), de nouvelles zones de plasticité sont observées. Le cyclage au même niveau entraîne une légère augmentation des niveaux de déformation dans ces zones.

Au troisième palier (T5 et T6), la déformation continue de se propager. Le cyclage au même niveau entraîne localement une évolution significative de la plasticité. Sur la courbe contrainte-déformation, l'effet Rochet devient significatif (i.e. les boucles se décalent de plus en plus à chaque cycle). Une première fissure à la surface (indiquée par une flèche verte) est observée sur les images issues de la caméra.

Au dernier palier (T7 et T8), la déformation s'accroît et se propage de part et d'autre de l'éprouvette. Le cyclage au même niveau entraîne encore une fois une augmentation significative de la plasticité dans les zones activées. D'un point de vue macroscopique, l'effet Rochet est très prononcé. On remarque que la corrélation d'images est perdue dans la zone déformée initialement (flèche rouge). Une analyse post-mortem révèle que localement, les colonies de la zone se sont déformées en dehors du plan au cours de l'essai, ce qui a modifié l'éclairage. La conservation des niveaux de gris nécessaire à la corrélation d'images est alors perdue.



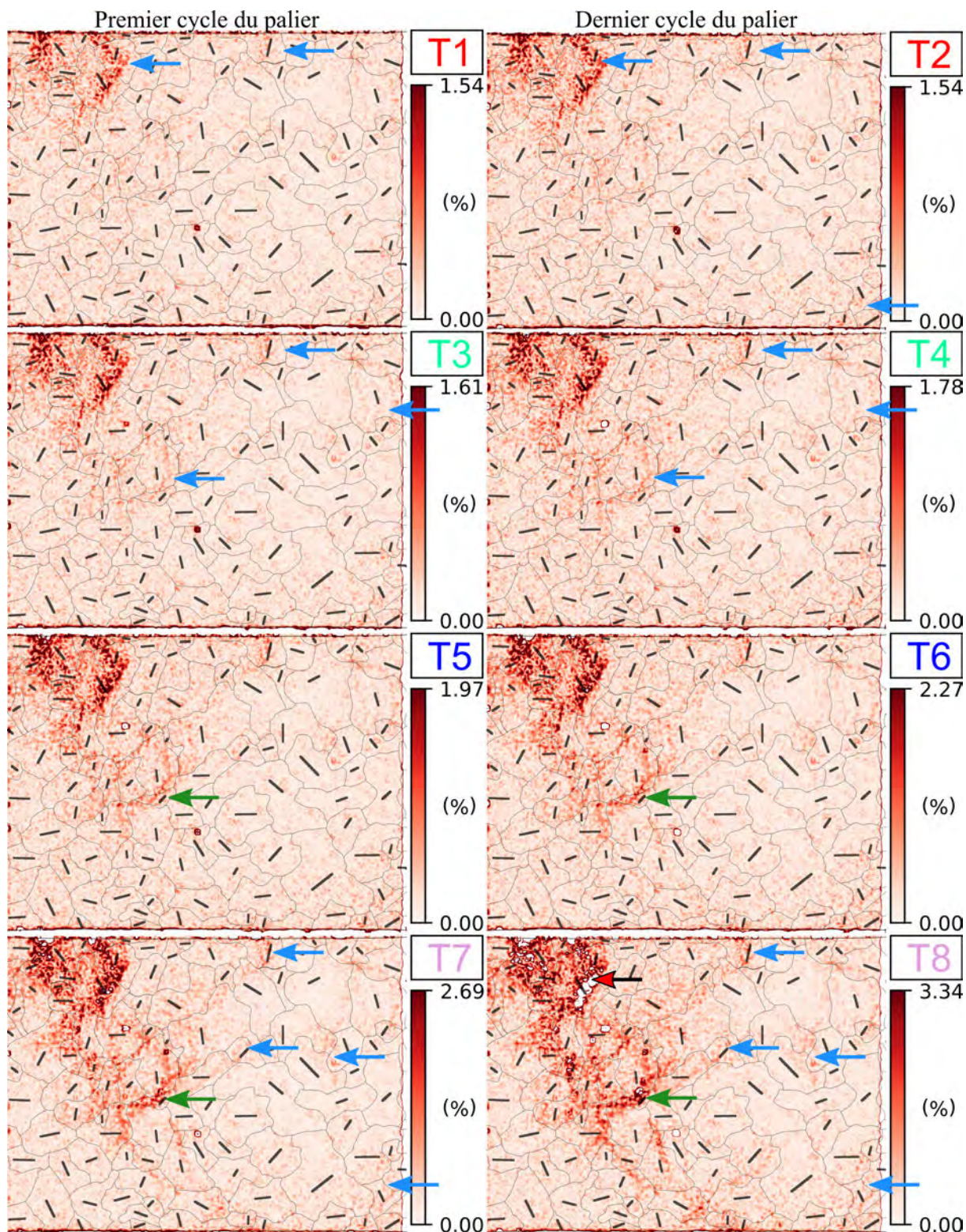


FIGURE 2.31 – Cartes des déformations  $\varepsilon_{xy(max)}$  calculées à partir des résultats des corrélations d’images à la décharge aux instants de chargement indiqués Figure 2.30. Les flèches bleues indiquent des zones de déformation discutées dans le corps du texte. Les flèches vertes indiquent des fissures observées en surface. La flèche rouge indique une zone où la corrélation d’images est perdue. Les traits noirs indiquent l’orientation apparente du plan d’interface lamellaire.

### 2.2.3.3 Discussion

Dans la section précédente (section 2.1), lors de l'analyse des essais cycliques macroscopiques, nous avons suggéré que l'anisotropie plastique prononcée des colonies lamellaires entraînait une activation séquentielle de la plasticité. Les résultats des essais micromécaniques confirment cette hypothèse.

En traction, les colonies se déformant en premier sont celles orientées environ à  $45^\circ$  près du bord, c'est-à-dire celles en mode mou (voir chapitre 1). Cette déformation a lieu alors que le comportement macroscopique est élastique. Lorsque le chargement augmente, ces colonies déjà déformées entraînent la déformation plastique des colonies adjacentes. Dans le même temps, de nouvelles zones de plasticité sont activées ailleurs dans la microstructure grâce à l'augmentation du niveau de contrainte. Lorsque le chargement augmente encore, un chemin de déformation plastique se trace à travers l'éprouvette en suivant les colonies les plus favorablement orientées les unes par rapports aux autres et par rapport à l'axe de chargement. Ce chemin correspond aux bandes de localisation que l'on peut observer avec des visions au loin de l'éprouvette.

Dans le cas d'un chargement cyclique, cette activation séquentielle est aussi valable. Lorsque seules les colonies en mode mou sont activées, la déformation plastique observée lors de chargements cycliques  $y$  est confinée. L'effet Rochet observé sur les courbes contrainte-déformation macroscopiques est alors faible. Lorsque la déformation est plus globale, le cyclage entraîne une augmentation et une propagation de la déformation plastique dans l'éprouvette. L'effet Rochet est alors très prononcé. On suggère donc que les colonies orientées en mode mou pourraient être des sites privilégiés d'amorçage de fissure en fatigue vu que leur plastification intervient dès les prémices du chargement.

D'un point de vue expérimental, les essais réalisés ici représentent une alternative intéressante vis-à-vis d'autres travaux de la littérature présentés dans l'étude bibliographique (voir chapitre 1). L'utilisation de moyens d'acquisition optique a permis d'observer en continu un champ contenant une centaine de colonies, là où seule une dizaine de colonies est généralement observée au cours d'essais *in situ* MEB.

## 2.3 Résumé des résultats expérimentaux

Dans un premier temps, les comportements mécaniques des quatre microstructures génériques des alliages TiAl ont été étudiés avec une vision macroscopique (i.e. contrainte-déformation). Il ressort de ces essais les points spécifiques indiqués en sous-section 2.1.7.

Notamment, une classification des comportements mécaniques en lien avec les mécanismes de déformation a été proposée. Les microstructures dont le comportement est contrôlé par les grains  $\gamma$  présentent une transition élasto-plastique très marquée. À l'opposé, les microstructures dont le comportement est contrôlé par les colonies lamellaires présentent une transition élasto-plastique peu marquée, que l'on suspectait séquentielle du fait de l'anisotropie plastique des colonies lamellaires.

La réalisation d'essais micromécaniques sur une microstructure presque- $\gamma$  et une microstructure totalement-lamellaire a permis de vérifier les origines de ces comportements en étudiant les champs de déformation à l'échelle de la microstructure.

Dans le cas de la microstructure presque- $\gamma$ , un essai *in situ* MEB a été réalisé. L'éprouvette a rompu dès l'atteinte de la limite d'élasticité, et aucune déformation n'a été observée avant. Bien que partiel, ce résultat appuie l'hypothèse d'une transition élasto-plastique soudaine.

Dans le cas de la microstructure totalement-lamellaire, les essais micromécaniques réalisés confirment que la transition élasto-plastique est séquentielle (voir sous-sous-section 2.2.3.3). L'anisotropie plastique des colonies est si importante que les colonies les mieux orientées se dé-

forment significativement alors que le comportement macroscopique est élastique. Dans le cas de chargements cycliques, on suspecte donc ces colonies d'être de potentiels sites d'amorçage de fissure privilégiés.

Ainsi, les résultats expérimentaux obtenus dans ce chapitre et les interprétations associées sont utilisés dans la suite de ce manuscrit pour proposer une modélisation multi-échelles du comportement mécanique des alliages TiAl.

## Chapitre 3

# Définition du modèle de plasticité cristalline : modélisation du comportement de monocolonies lamellaires

### Résumé :

L'objectif de chapitre est de définir le modèle de plasticité cristalline utilisé pour décrire le comportement mécanique des grains et colonies lamellaires dans les modèles éléments finis de microstructure. Le modèle employé pour évaluer la déformation plastique des différentes phases en présence et la transition d'échelle utilisée dans le cas des colonies lamellaires sont présentés. L'approche est validée via la modélisation du comportement mécanique de monocolonies lamellaires.

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Présentation du modèle de plasticité cristalline et des transitions d'échelles . .</b>	<b>90</b>
3.1.1	Choix vis-à-vis de l'étude bibliographique et des résultats expérimentaux	90
3.1.2	Évaluation de la plasticité : modèle de Méric-Cailletaud . . . . .	91
3.1.3	Transition d'échelle analytique pour l'évaluation de la plasticité à l'échelle des lamelles . . . . .	92
<b>3.2</b>	<b>Paramètres du modèle : phases monolithiques . . . . .</b>	<b>94</b>
3.2.1	Phase $\gamma$ . . . . .	95
3.2.2	Phase $\alpha_2$ . . . . .	97
3.2.3	Phase $\beta_0$ . . . . .	97
3.2.4	Lois d'écroissage . . . . .	98
<b>3.3</b>	<b>Paramètres du modèle : le cas des colonies lamellaires . . . . .</b>	<b>98</b>
3.3.1	Déformation des colonies lamellaires : étude des monocolonies . . . . .	98
3.3.2	Définition du multicouche & des systèmes de glissement . . . . .	101
3.3.3	Définition des paramètres à identifier à partir des essais sur monocristaux	102
3.3.4	Résultats & discussion . . . . .	103
3.3.5	Transfert des paramètres vers le cas du polycristal et à 750 °C . . . . .	105
<b>3.4</b>	<b>Résumé des points principaux . . . . .</b>	<b>107</b>

---

## 3.1 Présentation du modèle de plasticité cristalline et des transitions d'échelles

Une présentation du principe général des modèles de plasticité cristalline est proposée au chapitre 1. Ces modèles visent à décrire le comportement constitutif des grains et colonies lamellaires que l'on représente dans des modèles éléments finis de microstructure. Les modèles décrits ci-dessous sont disponibles dans la suite éléments finis [Zset-Software, 1996].

### 3.1.1 Choix vis-à-vis de l'étude bibliographique et des résultats expérimentaux

Il est ressorti de la revue bibliographique que la modélisation du comportement mécanique des alliages TiAl est limitée aux cas de la traction et de la compression à température ambiante. L'emploi de méthodes multi-échelles pour évaluer la plasticité dans le cas des microstructures contenant des colonies lamellaires complexifie nettement le problème. On rappelle que dans ce cas, l'idée est d'évaluer la plasticité à l'échelle des lamelles ( $< 1 \mu\text{m}$ ), sans les discrétiser dans le maillage par éléments finis d'une microstructure qui doit déjà représenter plusieurs dizaines de colonies lamellaires ( $> 100 \mu\text{m}$ ). L'objectif de cette sous-section est d'expliquer nos choix en termes de modélisation.

L'utilisation d'une transition d'échelle pour passer de l'échelle d'une colonie à un grain lamellaire entraîne la multiplication du nombre de variables internes du modèle utilisé. C'est pourquoi l'utilisation d'un modèle à base physique fondé sur une évaluation de la densité de dislocation n'a pas paru adapté à la problématique des alliages TiAl à l'heure de réaliser ces travaux. Sur la base de ce constat, on choisit d'utiliser un modèle phénoménologique basé sur des variables internes d'écrouissage, le modèle de Méric-Cailletaud [Méric and Cailletaud, 1991]. Ce modèle permet de décrire le comportement mécanique sous sollicitations cycliques à partir de lois empiriques.

Il est possible d'étudier la déformation en utilisant l'hypothèse des petites déformations (décomposition additive du gradient de la déformation  $F$ ) ou des grandes déformations (décomposition multiplicative du tenseur), cette dernière option augmentant significativement le temps de calcul. [Basseville et al., 2017], par la réalisation de calculs sur microstructures dans le cas de faibles déformations macroscopiques ( $< 1 \%$ ), ont montré que les champs mécaniques obtenus avec un modèle de plasticité cristalline phénoménologique dans le cadre des petites déformations, et ceux obtenus avec un modèle à base physique dans le cadre des grandes déformations sont identiques. On se place donc ici dans le cadre des petites déformations.

Le maillage est considéré comme un système de glissement comme les autres que l'on peut rendre potentiellement unidirectionnel pour tenir compte de son asymétrie comme dans [Cornec et al., 2015] ou [Geoffroy, 2013]. On fait ainsi une analogie entre la contrainte de cisaillement nécessaire à l'activation du maillage et une loi de Schmidt classique, comme proposé dans [Christian and Mahajan, 1995].

Si modéliser un adoucissement à l'aide d'un modèle de plasticité cristalline est possible que cela soit en traction (voir [Marano et al., 2019]) ou en cyclique (voir [Cruzado et al., 2017] ou [Onimus and Béchade, 2009]), nous n'avons pas trouvé d'exemple concret permettant de modéliser l'adoucissement transitoire prononcé observé expérimentalement dans le chapitre 2 pour les cas des microstructures presque- $\gamma$  et duplex (voir Figure 2.8). L'introduction de variables à retard comme utilisées pour modéliser les effets de vieillissement dynamique a été envisagée un temps comme une piste intéressante [Marchenko et al., 2016]. L'apport en termes de description du comportement étant incertain, et l'objectif principal étant la modélisation du comportement des microstructures lamellaires, cette piste n'a pas été poursuivie. L'adoucissement transitoire n'est donc pas pris en compte ici, ce qui impacte la qualité des résultats de la modélisation du comportement des microstructure presque- $\gamma$  et duplex à température ambiante. On procédera alors de la même façon que dans la littérature : un compromis sera trouvé sur la taille du domaine

élastique entre la description du comportement en traction et du comportement cyclique. La taille du domaine élastique sera donc potentiellement sous estimée lors de la première montée en charge.

### 3.1.2 Évaluation de la plasticité : modèle de Méric-Cailletaud

Le tenseur de vitesse de déformation totale  $\dot{\xi}$  se décompose en une partie élastique  $\dot{\xi}^e$  et d'une partie plastique  $\dot{\xi}^p$  :

$$\dot{\xi} = \dot{\xi}^e + \dot{\xi}^p = \underset{\sim}{\mathbf{C}}^{-1} : \dot{\sigma} + \dot{\xi}^p \quad (3.1)$$

avec  $\underset{\sim}{\mathbf{C}}$  le tenseur d'élasticité du grain considéré.

Soit  $\sigma$  le tenseur des contraintes macroscopiques. Pour chaque système de glissement  $s$  considéré, le cisssion résolue  $\tau_s$  associée est définie par :

$$\tau_s = \sigma : \underset{\sim}{\mathbf{m}}_s \quad \text{avec} \quad \underset{\sim}{\mathbf{m}}_s^l = (\vec{n}_s^l \otimes \vec{l}_s^l + \vec{l}_s^l \otimes \vec{n}_s^l)/2 \quad (3.2)$$

où  $\vec{l}_s^l$  et  $\vec{n}_s^l$  sont respectivement la direction de glissement et le plan de glissement, et  $m_s$  le tenseur d'orientation (ou tenseur de Schmidt).

Si la cisssion résolue  $\tau_s$  est supérieure à la cisssion critique résolue  $\tau_{0,s}$ , alors du cisaillement plastique  $\gamma_s$  a lieu sur le système de glissement  $s$ . La résultante de la vitesse de glissement du système,  $\dot{\gamma}_s$ , s'obtient alors par la relation :

$$\dot{\gamma}_s = \text{sign}(\tau_s - x_s) \left\langle \frac{|\tau_s - x_s| - r_s - \tau_{0,s}}{K_s} \right\rangle^{n_s} = \text{sign}(\tau_s - x_s) \dot{\nu}_s \quad (3.3)$$

avec  $r_s$  et  $x_s$  respectivement un écrouissage isotrope et un écrouissage cinématique, et  $K_s$  et  $n_s$  des paramètres définissant la viscosité, c'est-à-dire la sensibilité aux effets de vitesse de déformation.

Les variables d'écrouissage permettent de représenter le durcissement ou l'adoucissement du matériau au cours de l'écoulement plastique.

L'écrouissage isotrope modifie la taille du domaine élastique associé à chaque système de glissement  $s$ , ce qui traduit le durcissement (ou l'adoucissement) provoqué par les interactions entre dislocations. Son évolution linéaire ou non linéaire en fonction du glissement plastique est donnée par :

$$r_s = H \sum_r h_{sr} \gamma_s \quad \text{ou} \quad r_s = Q \sum_r h_{sr} (1 - e^{-b\nu_s}) \quad (3.4)$$

avec  $Q$  et  $H$  des variables scalaires.  $Q$  définit la valeur asymptotique de  $r_s$  et  $b$  la vitesse à laquelle elle est atteinte. Dans le cas de l'écrouissage linéaire,  $H$  définit la pente de l'écrouissage.

La matrice  $h_{sr}$  est la matrice d'écrouissage qui traduit les interactions entre systèmes de glissement. Si  $s = j$ , on parle d'auto-écrouissage, dû typiquement à un effet Hall-Petch. Si  $s \neq j$  on parle d'écrouissage latent, c'est-à-dire que la résistance du système de glissement  $s$  dépend de l'activité du système  $j$  même si  $s$  n'est pas actif. La forme de la matrice dépend du système cristallographique étudié. Cette matrice peut être déterminée par la réalisation de simulations en Dynamique des Dislocations (DD) [Queyreau et al., 2009] ou par identification inverse sur des expériences adaptées [Gérard et al., 2009, Schnabel and Bargmann, 2017]. Néanmoins, faute d'informations suffisantes, cette matrice est la plupart du temps définie comme la matrice identité ou la matrice unité.

L'écrouissage cinématique modifie la position du domaine élastique associé à chaque système de glissement  $s$ , ce qui permet de rendre compte de l'effet Bauschinger [Frederick and Armstrong, 2007, Cailletaud, 1992]. Contenant un terme de rappel (c.a.d. tension sur un système de

glissement), il est défini par la relation :

$$x_s = c\alpha_s \quad \text{avec} \quad \dot{\alpha}_s = (\text{sign}(\tau_s - x_s) - d\alpha_s)\dot{\nu}_s \quad (3.5)$$

avec  $c$  et  $d$  respectivement l'écroissage direct et le coefficient de retour dynamique. Sa valeur à saturation est définie par :

$$x_{sat} = c/d \quad (3.6)$$

Cet écroissage représente une contrainte de retour liée aux interactions sur de grandes distances. On note qu'on ne considère pas dans notre modélisation d'interaction entre les systèmes de glissement.

Le tenseur de vitesse de déformation visco-plastique  $\dot{\varepsilon}^p$  est alors défini comme la somme des contributions des systèmes de glissement considérés tel que :

$$\dot{\varepsilon}^p = \sum_s \dot{\gamma}_s \underline{\mathbf{m}}_s \quad (3.7)$$

On résume les paramètres à identifier pour une famille de systèmes  $s$  :

- la cission critique résolue  $\tau_{0,s}$  (l'équivalent de la limite d'élasticité) ;
- les paramètres de sensibilité aux effets de vitesse,  $K_s$  et  $n_s$  (loi de Norton) ;
- les paramètres de la loi d'écroissage isotrope (modification de la taille du domaine élastique), soit  $H$  ou  $Q$  et  $b$  ;
- les paramètres de la loi d'écroissage cinématique (déplacement du centre du domaine élastique), soit  $c$  et  $d$ .

### 3.1.3 Transition d'échelle analytique pour l'évaluation de la plasticité à l'échelle des lamelles

L'objectif est d'évaluer la plasticité à l'échelle des lamelles dans une colonie lamellaire. Pour cela, une transition d'échelle analytique développée à l'Onera et détaillée dans [Roos et al., 2004] est utilisée. Ce schéma d'homogénéisation correspond à la solution exacte d'un problème d'homogénéisation considérant une plaque infinie se répétant périodiquement. Son utilisation suppose donc que dans la structure lamellaire, l'épaisseur des lamelles  $D_{lam}$  soit très inférieure à la taille des domaines  $D_{dom}$ , telle que  $D_{lam} \ll D_{dom}$  (Figure 3.1). Dans le cas des alliages TiAl, cette approximation est vraie d'après différentes caractérisations microstructurales disponibles dans la littérature [Yasuda et al., 1996b, Umeda et al., 1997, Schnabel et al., 2019, Edwards et al., 2019b].

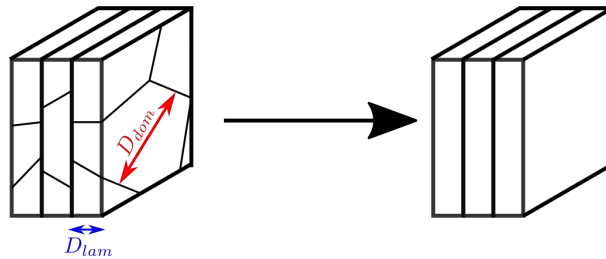


FIGURE 3.1 – Schéma représentant l'approximation de la structure lamellaire comme un multicouche. La taille des domaines  $D_{dom}$  est très supérieure à l'épaisseur des lamelles  $D_{lam}$ .

Le schéma d'homogénéisation est écrit dans le cadre de la Transformation Field Analysis (TFA) [Dvorak, 1992]. Cette méthode se base sur une redistribution purement élastique des déformations et des contraintes macroscopiques, mais aussi des *eigenstress* et *eigenstrain* locales.

Les *eigenstrain* sont toutes les déformations non élastiques comme la dilatation thermique ou la déformation plastique. Les *eigenstress* sont les contraintes internes auto-équilibrées causées par une ou plusieurs *eigenstrain*. Dans le cadre de la TFA, une phase est définie comme élastique homogène sans restriction sur son type d'élasticité (isotrope, anisotrope).

Soit  $\underline{\sigma}^{ip}$  le tenseur des contraintes au point d'intégration d'un élément d'un maillage éléments finis. Le principe général de cette transition d'échelle consiste à localiser cette contrainte macroscopique dans les lamelles d'un multicouche contenant  $Nb_{lam}$  lamelles. On considère les contraintes et les déformations uniformes dans les lamelles (ce qui a été confirmé par la réalisation de calculs éléments finis dans [Roos et al., 2004]). Dans la lamelle  $l$ , les composantes du tenseur des contraintes normales au plan d'interface lamellaire,  ${}^N\underline{\sigma}^l$ , sont continues (en rouge sur la Figure 3.2). Les composantes du tenseur des déformations parallèles au plan d'interface,  ${}^L\underline{\varepsilon}^l$ , sont continues (en vert sur la Figure 3.2). Grâce à ces hypothèses, plusieurs grandeurs permettant d'explicitier la transition d'échelle peuvent être calculées.

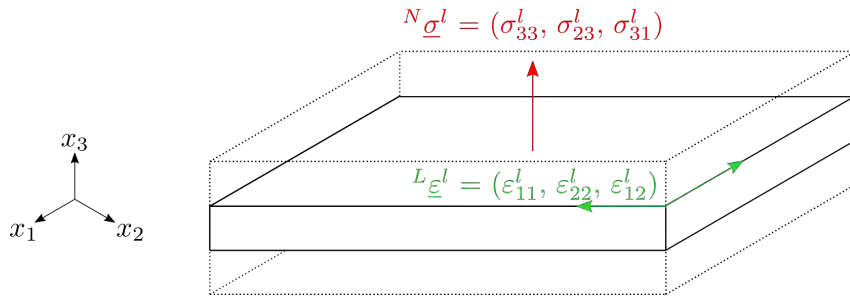


FIGURE 3.2 – Schéma du problème d'homogénéisation correspondant au cas de lamelles dans un milieu périodique. Les contraintes normales au plan d'interface,  ${}^N\underline{\sigma}$ , et les déformations longitudinales dans le plan d'interface,  ${}^L\underline{\varepsilon}$ , sont continues d'une lamelle à une autre.

On définit  $\underline{\mathbf{C}}^{mc}$  le tenseur d'élasticité représentant les propriétés élastiques effectives du multicouche,  $\underline{\mathbf{B}}^l$  le tenseur de localisation de la contrainte dans la lamelle  $l$  et  $\underline{\mathbf{F}}^{ln}$  le tenseur d'influence des *eigenstrain* des lamelles  $n$  sur la lamelle  $l$ . Ces tenseurs sont calculés en résolvant l'ensemble d'équations indiqué dans [Roos et al., 2004]. Ils dépendent uniquement des propriétés élastiques des lamelles considérées dans le multicouche et sont calculés une seule fois au début de la simulation.

En supposant l'état de déformation connu, le tenseur  $\underline{\sigma}^{ip}$  au point d'intégration s'obtient par la loi de Hooke :

$$\underline{\sigma}^{ip} = \underline{\mathbf{C}}^{mc} : (\underline{\varepsilon}^{ip} - \underline{\varepsilon}^{p,ip}) \quad (3.8)$$

avec  $\underline{\varepsilon}^{ip}$  et  $\underline{\varepsilon}^{p,ip}$  respectivement le tenseur des déformations totales et le tenseur des déformations plastiques au point d'intégration.

Ensuite, le tenseur des contraintes  $\underline{\sigma}^l$  dans la lamelle  $l$  est obtenu par la règle de localisation suivante :

$$\underline{\sigma}^l = \underline{\mathbf{B}}^l : \underline{\sigma}^{ip} - \sum_{n=1}^{Nb_{lam}} \underline{\mathbf{F}}^{ln} : \underline{\mathbf{C}}^n : \underline{\varepsilon}^{p,n} \quad (3.9)$$

avec  $\underline{\mathbf{C}}^n$  le tenseur d'élasticité de la lamelle  $n$  et  $\underline{\varepsilon}^{p,n}$  le tenseur de déformation plastique de la lamelle  $n$ .

Puis la déformation plastique  $\underline{\varepsilon}^{p,l}$  dans la lamelle  $l$  s'obtient en utilisant le modèle de plasticité cristalline décrit précédemment. Avec  $\dot{\gamma}_s^l$  la résultante de la vitesse de glissement du système de



glissement  $s$ ,  $\underline{\varepsilon}^{p,l}$  s'écrit :

$$\underline{\varepsilon}^{p,l} = \sum_s \int_t^{t+dt} \dot{\gamma}_s^l dt \quad (3.10)$$

Enfin, la déformation macroscopique, c'est-à-dire au point d'intégration d'un élément d'un maillage éléments finis, s'obtient par homogénéisation :

$$\underline{\varepsilon}^{p,ip} = \sum_{n=1}^{N_{blam}} c^l \underline{\mathbf{B}}^{lT} \underline{\varepsilon}^{p,l} \quad (3.11)$$

avec  $c^l$  la fraction volumique de la lamelle  $l$ .

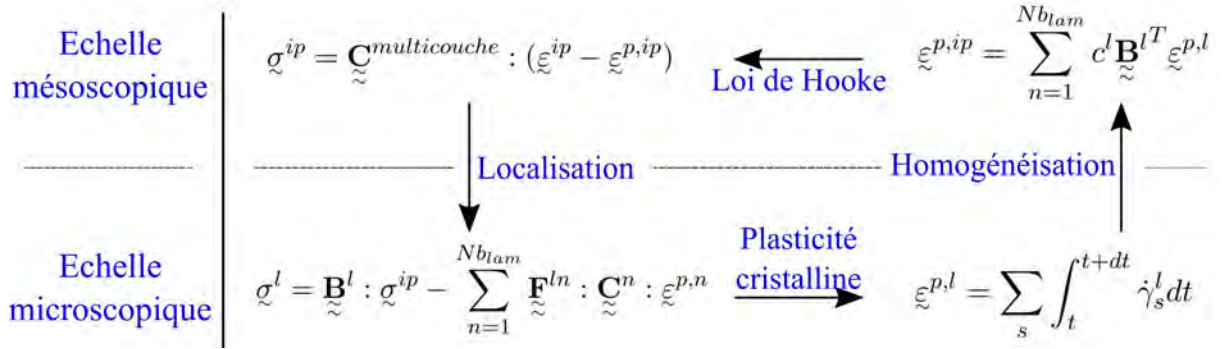


FIGURE 3.3 – Schéma résumant le principe de la transition d'échelle utilisée. La signification des grandeurs est indiquée dans le texte. La solution du problème d'homogénéisation correspond au cas de lamelles infinies dans un milieu périodique comme présenté en Figure 3.2.

Le schéma proposé en Figure 3.3 résume le fonctionnement et les points clés de la transition d'échelle utilisée. La règle de transition présente plusieurs caractéristiques intéressantes :

- la transition d'échelle est complètement découplée du modèle de plasticité cristalline (qui permet de calculer le tenseur de plasticité à l'échelle des lamelles) ;
- il n'y a pas de restriction sur le type d'élasticité des lamelles, et l'on peut donc utiliser un tenseur d'élasticité anisotrope. La prise en compte de l'anisotropie élastique est essentielle lorsque l'on s'intéresse au cas de petites déformations car elle permet de prévoir plus précisément l'activation des premiers systèmes de glissement comme montré dans [Sauzay, 2006] ;
- le tenseur de localisation  $\underline{\mathbf{B}}^l$  et le tenseur d'influence  $\underline{\mathbf{F}}^{ln}$  permettent de tenir compte de l'influence de la déformation de toutes les lamelles contenues dans le multicouche sur la lamelle  $l$  considérée.

## 3.2 Paramètres du modèle : phases monolithiques

Lors de l'utilisation d'un modèle de plasticité cristalline, chaque phase cristallographique considérée dispose de son propre jeu de paramètres. Les résultats obtenus dépendent alors des systèmes de glissement considérés, des cissions critiques associées à ces systèmes, du type d'élasticité et des lois d'érouissage utilisées. Dans le cas des microstructures que l'on souhaite modéliser, on retrouve trois types de phases sous la forme de grains globulaires : la phase  $\gamma$  monolithique, la phase  $\alpha_2$  monolithique, et la phase  $\beta_0$ .

L'objectif de cette section est de définir pour chaque phase les systèmes de glissement utilisés, les paramètres fixés, et ceux restant à identifier. Pour cela, on se base sur les études expérimentales et numériques réalisées sur ces différentes phases. On rappelle que des éléments clés pour

comprendre la déformation des alliages TiAl sont présentés dans la revue bibliographique (chapitre 1).

### 3.2.1 Phase $\gamma$

La phase  $\gamma$  est quadratique ( $L1_0$ ), mais traitée comme une phase cubique à faces centrées par soucis de simplicité. Trois mécanismes de déformation sont recensés : les dislocations ordinaires, les superdislocations, le maclage. On rappelle la problématique soulevée dans le chapitre 1 : les superdislocations ne sont jamais observées expérimentalement. Or, si l'on considère le maclage comme un mécanisme unidirectionnel sans considérer les superdislocations, il n'y a pas cinq mécanismes de déformation indépendants. Le critère de compatibilité de von Mises n'est alors pas validé [Mises, 1928, Groves and Kelly, 1963].

Comme dit dans le chapitre 1, il n'y a pas d'essais sur monocristaux représentatifs du comportement des grains  $\gamma$  globulaires, donc pas d'estimation expérimentale des cissions critiques résolues. Dans les travaux numériques précédemment réalisés [Marketz et al., 2003, Kabir et al., 2010], les auteurs considèrent les superdislocations. Selon les travaux, la cission critique des superdislocations,  $\tau_0^{su}$ , est définie comme égale à celles des dislocations ordinaires et du maclage,  $\tau_0^{do}$  et  $\tau_0^{ma}$ , ou légèrement supérieure pour représenter le fait que les superdislocations sont rarement observées. C'est-à-dire :

$$\tau_0^{do} = \tau_0^{ma} = \tau_0^{su} \quad \text{ou} \quad \tau_0^{do} = \tau_0^{ma} < \tau_0^{su} \quad (3.12)$$

[Kabir et al., 2010] montrent qu'avec cette dernière option, lors de la réalisation de calculs sur microstructure, la contribution des superdislocations à la déformation plastique reste majeure.

Une autre option serait simplement de ne pas considérer les superdislocations pour la phase  $\gamma$  globulaire. Cela nécessite en revanche de considérer le maclage comme un système de glissement classique, et non unidirectionnel, afin de satisfaire le critère de compatibilité de von Mises. Pour appuyer ce choix, on précise que plusieurs équipes ont observé des mouvements en arrière de dislocations de macles [Farenc et al., 1993, Beran et al., 2016], notamment lors de l'inversion du sens de chargement au cours de chargements cycliques. On définit alors :

$$\tau_0^{do} = \tau_0^{ma} = \tau_0^\gamma \quad (3.13)$$

avec  $\tau_0^\gamma$  la cission critique commune aux deux mécanismes de déformation identifier.

Mécanisme de déformation	Systèmes de glissement			
Dislocation ordinaire	$(111)[\bar{1}10]$	$(\bar{1}11)[110]$	$(1\bar{1}1)[110]$	$(11\bar{1})[\bar{1}10]$
Maclage	$(111)[11\bar{2}]$	$(\bar{1}11)[\bar{1}1\bar{2}]$	$(1\bar{1}1)[1\bar{1}\bar{2}]$	$(11\bar{1})[112]$

TABLEAU 3.1 – Systèmes de glissement considérés dans le modèle de plasticité cristalline pour la phase  $\gamma$  globulaire.

L'option à retenir ici a un impact sur le comportement mécanique de la phase  $\gamma$ . [Brockman, 2003] a montré que l'anisotropie plastique de cette phase pouvait être mise en évidence via la réalisation de simulations d'essais de traction pour différents angles entre l'axe  $c$  de la structure cristallographique et l'axe de chargement. L'évolution de la limite d'élasticité en fonction de cet angle donne alors une idée de l'anisotropie de la phase  $\gamma$ .

Afin de démontrer l'impact des systèmes de glissement considérés sur le comportement mécanique, ce travail est réalisé pour le cas où les superdislocations sont considérées, ainsi que pour le cas où celles-ci sont supprimées. On définit  $\tau_0^\gamma = 130$  MPa (issu de [Marketz et al., 2003]). Avec  $\sigma_0$  la limite d'élasticité, le ratio d'anisotropie  $R$  est défini tel que :

$$R = \frac{\sigma_0}{\min(\sigma_0)} \quad (3.14)$$

L'étude du ratio d'anisotropie permet de s'affranchir de la valeur de  $\tau_0^\gamma$  (i.e. si  $\tau_0^\gamma$  est modifiée, la courbe est translatée dans l'espace des contraintes). L'évolution du ratio d'anisotropie en fonction de l'angle entre l'axe  $c$  et l'axe de chargement est présentée en Figure 3.4.

Dans le cas où les superdislocations sont considérées (trait rouge), le ratio d'anisotropie maximal est d'environ 1,2 . Dans le cas où celles-ci ne sont pas considérées (trait bleu), un pic est observé et le ratio d'anisotropie maximal est supérieur à 1,4 . Pour des angles compris entre  $20^\circ$  et  $45^\circ$ , le comportement est donc significativement affecté.

Les superdislocations n'étant jamais observées expérimentalement, le cas sans les superdislocations nous semble plus représentatif du comportement des grains  $\gamma$  dans les microstructures des alliages TiAl. L'option sans les superdislocations est donc retenue pour la suite du travail. Les systèmes de glissement considérés dans le modèle de plasticité cristalline sont indiqués dans le Tableau 3.1.

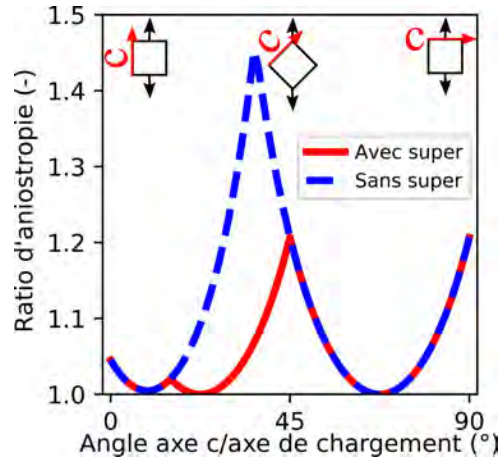


FIGURE 3.4 – Évolution du ratio d'anisotropie de la phase  $\gamma$  en fonction de l'angle axe  $c$ /axe de chargement.

Nous avons montré au chapitre 2 que c'est la présence de grains  $\gamma$  globulaires qui pilote la sensibilité aux effets de vitesse de déformation. Les paramètres du modèle associés à cette sensibilité,  $n^\gamma$  et  $K^\gamma$  doivent donc être identifiés pour la modélisation des essais à  $750^\circ\text{C}$ .

En ce qui concerne l'élasticité, on retrouve deux tenseurs dans la littérature : le premier issu de calculs théoriques [Yoo and Fu, 1998, Fu and Yoo, 1990, He et al., 1995], le second de résultats expérimentaux [Tanaka, 1996]. Les valeurs sont indiquées dans le Tableau 3.2.

[Kabir et al., 2010] montrent que le tenseur provenant de résultats expérimentaux estime mieux les propriétés élastiques des alliages d'intérêt après calcul sur microstructure et homogénéisation. Le tenseur expérimental de [Tanaka, 1996] est donc utilisé par la suite.

Les résultats expérimentaux du chapitre 2 montrent que les modules d'Young des différentes microstructures diminuent à  $750^\circ\text{C}$ . Le tenseur d'élasticité doit donc être ajusté. Comme aucune mesure des composantes du tenseur n'est disponible à cette température, on propose d'abattre les valeurs de toutes les constantes élastiques à l'aide d'un facteur  $\phi_{el}^\gamma$ . L'anisotropie élastique du tenseur est alors conservée.

-	$C_{1111}$	$C_{2222}$	$C_{3333}$	$C_{1122}$	$C_{1133}$	$C_{2233}$	$C_{1212}$	$C_{2323}$	$C_{3131}$
Théorique	190	190	185	105	90	90	50	120	120
Expérimental	183	183	178	74,1	74,4	74,4	78,4	105	105

TABLEAU 3.2 – Tenseurs d'élasticité de la phase  $\gamma$ -TiAl à 20 °C. Les valeurs sont en GPa. Les données théoriques sont issues de [Yoo and Fu, 1998, Fu and Yoo, 1990, He et al., 1995], les valeurs expérimentales de [Tanaka, 1996].

### 3.2.2 Phase $\alpha_2$

La phase  $\alpha_2$  est tétragonale compacte. Cette phase participe très peu à la déformation (voir chapitre 1). On considère le glissement sur le plan basal, prismatique et pyramidal tel qu'indiqué dans le Tableau 3.3

Des résultats expérimentaux sur monocristaux représentatifs des grains  $\alpha_2$  que l'on trouve dans les alliages TiAl multiphasés ont permis d'estimer les cisssions critiques résolues [Appel et al., 2011]. D'une façon générale, il est admis qu'il existe un ratio entre les cisssions tel que :

$$\tau_0^{pr} : \tau_0^{ba} : \tau_0^{py} = 1 : 3 : 9 \quad (3.15)$$

On utilise par la suite les valeurs déterminées par [Inui et al., 1993] avec à 20 °C :

$$\tau_0^{pr,20^\circ\text{C}} = 100 \text{ MPa} \quad ; \quad \tau_0^{ba,20^\circ\text{C}} = 330 \text{ MPa} \quad ; \quad \tau_0^{py,20^\circ\text{C}} = 910 \text{ MPa} \quad (3.16)$$

et à 750 °C :

$$\tau_0^{pr,750^\circ\text{C}} = 35 \text{ MPa} \quad ; \quad \tau_0^{ba,750^\circ\text{C}} = 200 \text{ MPa} \quad ; \quad \tau_0^{py,750^\circ\text{C}} = 545 \text{ MPa} \quad (3.17)$$

Mode de déformation	Systèmes de glissement		
Basal	(0001)[11 $\bar{2}$ 0]	(0001)[1 $\bar{2}$ 10]	(0001)[ $\bar{2}$ 110]
Prismatique	(10 $\bar{1}$ 0)[1 $\bar{2}$ 10]	(01 $\bar{1}$ 0)[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	( $\bar{1}$ 100)[11 $\bar{2}$ 0]
Pyramidal	( $\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ 1)[ $\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ $\bar{6}$ ]	(2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2)[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{6}$ ]	(11 $\bar{2}$ 1)[11 $\bar{2}$ $\bar{6}$ ]
	(1 $\bar{2}$ 11)[121 $\bar{6}$ ]	(2111)[ $\bar{2}$ 11 $\bar{6}$ ]	( $\bar{1}$ $\bar{1}$ 21)[ $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2 $\bar{6}$ ]

TABLEAU 3.3 – Systèmes de glissement considérés dans le modèle de plasticité cristalline pour la phase  $\alpha_2$  globulaire.

Les grains  $\alpha_2$  sont supposés quasi-indépendants aux effets de vitesse en fixant  $n^{\alpha_2} = 15$  et  $K^{\alpha_2} = 1$  comme proposé dans [Geoffroy, 2013].

En ce qui concerne l'élasticité, là encore un tenseur théorique déterminé par calcul et un tenseur déterminé expérimentalement sont disponibles. Les composantes de ces tenseurs sont données dans le Tableau 3.4. Pour rester cohérent avec le choix précédent, on utilise aussi les valeurs déterminées expérimentalement par [Tanaka et al., 1996]. Les constantes élastiques seront abattues si nécessaire avec un facteur  $\phi_{el}^{\alpha_2}$ .

### 3.2.3 Phase $\beta_0$

La phase  $\beta_0$  est cubique centrée. Dans le chapitre 1, nous avons vu qu'elle ne contribue quasiment pas à la déformation et qu'elle n'est généralement pas prise en compte dans les simulations.

On fait alors le choix de considérer cette phase comme purement élastique. Comme pour l'instant le tenseur d'élasticité n'a été ni calculé, ni déterminé expérimentalement, une hypothèse

-	$C_{1111}$	$C_{2222}$	$C_{3333}$	$C_{1122}$	$C_{1133}$	$C_{2233}$	$C_{1212}$	$C_{2323}$	$C_{3131}$
Théorie	221	221	238	71	85	85	75	69	69
Expérimental	175	175	220	88,7	62,3	62,3	43,15	62,6	62,6

TABLEAU 3.4 – Tenseurs d'élasticité de la phase  $\alpha_2$ -Ti<sub>3</sub>Al. Les valeurs sont en GPa. Les données théoriques sont issues de [Yoo and Fu, 1998, Fu et al., 1995], les valeurs expérimentales de [Tanaka et al., 1996]

d'isotropie élastique est retenue. On définit un coefficient de Poisson  $\nu_{\beta_0}$  et un module d'Young  $E_{\beta_0}$  tel que :

$$E_{\beta_0} = E_{macro} \quad ; \quad \nu_{\beta_0} = 0,3 \quad (3.18)$$

avec  $E_{macro}$  le module d'Young macroscopique de la microstructure considérée.

Concrètement, cette phase aura donc le rôle d'une inclusion rigide dans la microstructure presque- $\gamma$  avec des propriétés élastiques proches de celles des autres phases en présence. Cela semble être un choix cohérent vis-à-vis des diverses observations expérimentales réalisées dans la littérature (voir chapitre 1).

### 3.2.4 Lois d'écrouissage

Les résultats expérimentaux obtenus au chapitre 2 montrent que l'on n'observe pas d'écrouissage isotrope sur le comportement macroscopique contrainte-déformation. On considère alors, pour les phases  $\alpha_2$  et  $\gamma$ , uniquement une loi d'écrouissage cinématique. Quatre paramètres doivent donc être identifiés :

$$(c, d)^\gamma \quad ; \quad (c, d)^{\alpha_2} \quad (3.19)$$

avec  $(c, d)^\gamma$  et  $(c, d)^{\alpha_2}$  respectivement les couples de paramètres pour la phase  $\gamma$  et la phase  $\alpha_2$ .

On précise que le même écrouissage est appliqué à toutes les familles de systèmes de glissement même si leurs cissions critiques sont différentes. Par exemple, dans le cas de la phase  $\alpha_2$ , les systèmes de glissement du mode pyramidal et du mode prismatique suivent la même loi d'écrouissage cinématique avec le même couple de valeurs  $(c, d)^{\alpha_2}$ .

## 3.3 Paramètres du modèle : le cas des colonies lamellaires

L'étude bibliographique réalisée au chapitre 1 et les résultats expérimentaux du chapitre 2 ont montré que le comportement des colonies lamellaires est fortement plastique anisotrope. L'enjeu de cette section est de déterminer la viabilité du modèle multicouche pour modéliser ce comportement. On propose de valider l'approche en modélisant les caractéristiques principales du comportement des monocolonies lamellaires PST. Il s'agit de l'équivalent de monocristaux : une éprouvette contient une seule colonie lamellaire, et l'on connaît l'angle entre le plan d'interface des lamelles et l'axe de chargement.

Dans un premier temps, des résultats expérimentaux issus de la littérature révélant les éléments clés du comportement des monocolonies sont présentés. On définit ensuite la constitution du multicouche, les systèmes de glissement des différentes lamelles, puis les paramètres à identifier. Les résultats d'essais sur monocolonies sont alors modélisés afin de valider le modèle multicouche. Pour finir, on montre que ce travail permet de pré-identifier un certain nombre de paramètres avant le passage au cas d'un polycristal lamellaire.

### 3.3.1 Déformation des colonies lamellaires : étude des monocolonies

La déformation d'une colonie lamellaire est caractérisée par trois modes de déformation :

- **Mode mou ou longitudinal** (Figure 3.5.(a)) : lorsque l'angle entre l'axe de chargement et le plan d'interface lamellaire est d'environ  $45^\circ$ , les systèmes de glissements les plus favorables se situent dans le plan d'interface lamellaire avec un facteur de Schmidt élevé ( $> 0,4$ ). Les libres parcours des macles et des dislocations sont importants et seulement obstrués par les interfaces entre domaines.
- **Mode dur ou transverse** (Figure 3.5.(b)) : lorsque les lamelles sont perpendiculaires à l'axe de chargement, les systèmes de glissements les plus favorables n'ont pas un facteur de Schmidt élevé (0,3 maximum pour le maclage), et sont ceux dont le plan et le sens de glissement sont transverses au plan d'interface lamellaire.
- **Mode mixte** (Figure 3.5.(c)) : lorsque les lamelles sont parallèles à l'axe de chargement, les systèmes de glissements les plus favorables ont un facteur de Schmidt élevé (0,4 maximum). Le sens de glissement se situe dans les lamelles, mais le plan de glissement est transverse aux interfaces.

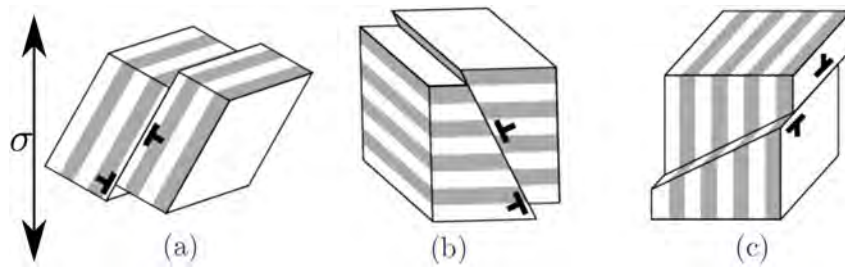


FIGURE 3.5 – Schéma expliquant la déformation dans la structure lamellaire adapté de [Werwer and Cornec, 2006]. (a) Mode mou : lamelles en diagonales = plan de déformation et sens de glissement dans le plan d'interface lamellaire, (b) Mode dur : lamelles perpendiculaires = plan de déformation et sens de glissement transverses au plan d'interface, (c) Mode mixte : lamelles parallèles = sens de glissement dans le plan des lamelles, mais plan de déformation transverse.

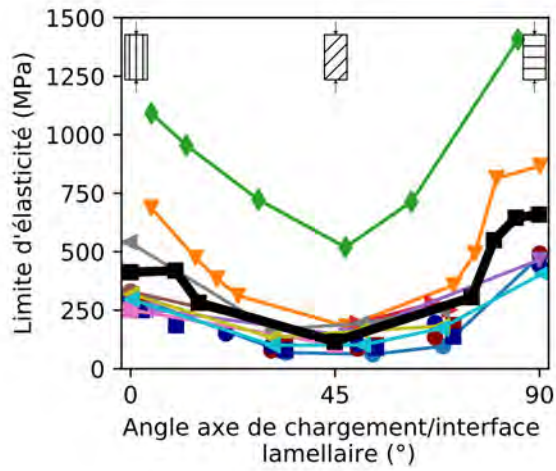
La première caractéristique du comportement est l'anisotropie plastique. Elle est caractérisée par l'évolution de la limite d'élasticité en fonction de l'angle entre l'axe de chargement et le plan d'interface lamellaire. La Figure 3.6 présente tout un pan de résultats expérimentaux issus de la littérature, avec des expériences réalisées aussi bien sur monocolonies que sur micropilliers (voir chapitre 1). On observe une forme en U caractéristique pour toutes les études. Les niveaux de contrainte sont différents, ce qui s'explique par des différences en termes de paramètres microstructuraux (composition d'alliage, espacement lamellaire, taille de domaine).

Pour s'affranchir de ces effets matériau, on peut, comme précédemment, définir le ratio d'anisotropie  $R$  tel que :

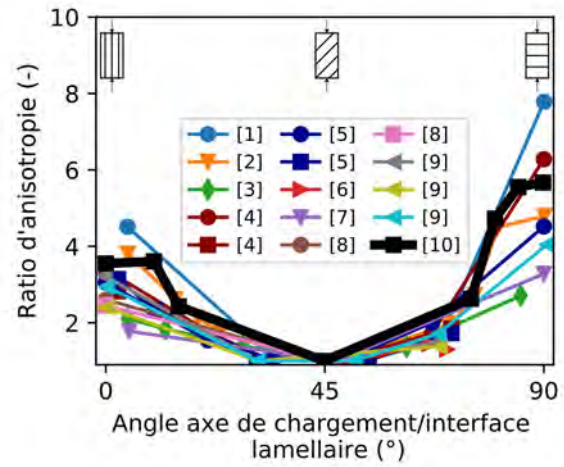
$$R = \frac{\sigma_0}{\min(\sigma_0)} \quad (3.20)$$

L'évolution de ce ratio en fonction de l'angle entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement est présentée en Figure 3.6b. Bien qu'une dispersion expérimentale importante soit observée lorsque les lamelles sont perpendiculaires au chargement, les ratios d'anisotropie des différentes études sont cohérents. On note que le ratio d'anisotropie ici est bien plus important que celui de la phase  $\gamma$  globulaire (Figure 3.4). Les résultats expérimentaux de [Lebensohn et al., 1998, Uhlenhut, 1999] (courbes noires) sont très complets et donnent des informations intéressantes sur la déformation. On s'y intéresse donc plus en détails ci-dessous.

Les courbes contrainte-déformation plastique associées aux résultats de la courbe noire de la Figure 3.6 sont présentées en Figure 3.7. On définit  $\phi$  comme l'angle entre l'axe de chargement et le plan d'interface des lamelles. Pour  $\phi = 0, 45, 90^\circ$  (Figure 3.7a) on observe un écrouissage



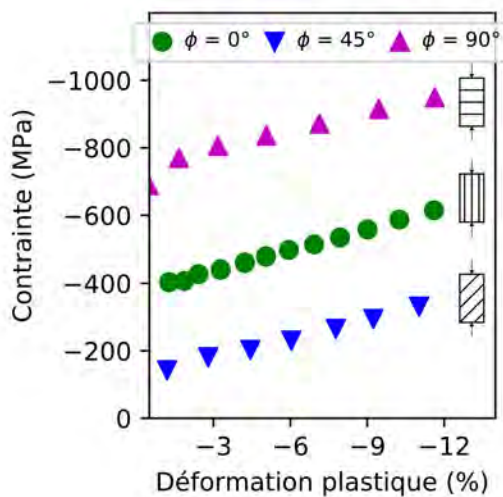
(a) Évolution de la limite d'élasticité en fonction de l'angle axe de chargement/interface lamellaire.



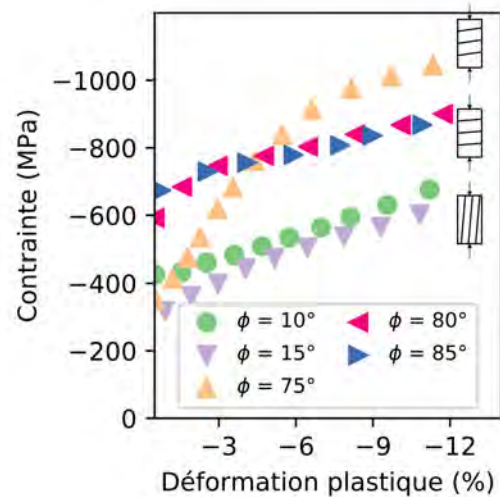
(b) Évolution du ratio d'anisotropie en fonction de l'angle axe de chargement/interface lamellaire.

L'étude du ratio d'anisotropie permet de s'affranchir de l'effet de dépendance au matériau.

FIGURE 3.6 – Étude de l'anisotropie plastique des monocolonies lamellaires via l'analyse d'essais de traction ou de compression de la littérature. [1] [Fujiwara et al., 1990] [2] [Chen et al., 1999] [3] [Palomares-García et al., 2017] [4] [Fujiwara et al., 1990] [5] [Fujiwara et al., 1990] [6] [Porter et al., 2009] [7] [Parthasarathy et al., 1998] [8] [Yasuda et al., 1996a] [9] [Umeda et al., 1997] [10] [Lebensohn et al., 1998, Uhlenhut, 1999].



(a) Résultats pour des angles  $\phi$  caractéristiques des modes de déformation.



(b) Résultats pour des angles  $\phi$  à la frontière entre modes de déformation.

FIGURE 3.7 – Courbes contrainte-déformation issues d'essais de compression sur monocristaux lamellaires réalisés par [Uhlenhut, 1999].  $\phi$  est l'angle entre l'axe de chargement et le plan d'interface lamellaire.

linéaire. Les rapports entre les contraintes pour les différents angles sont les mêmes du début à la fin de l'essai. Il en est de même pour les angles  $\phi = 10, 15^\circ$  et  $\phi = 80, 85^\circ$  (Figure 3.7b). Par contre, pour  $\phi = 75^\circ$ , la limite d'élasticité initiale est faible, mais un écoulement prononcé est observé. A la fin de l'essai la contrainte est supérieure à celle de tous les autres essais. Ce comportement s'explique par le fait que pour  $\phi = 75^\circ$ , on se situe à la transition entre le mode mou et le mode dur. Il y a alors des interactions complexes entre les différents systèmes de glissement.

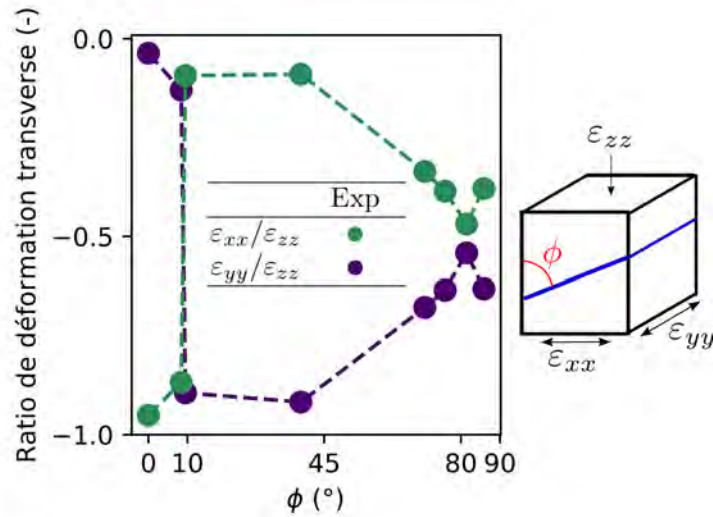


FIGURE 3.8 – Évolution du ratio entre les déformations transverses,  $\varepsilon_{xx}$  et  $\varepsilon_{yy}$ , et la déformation appliquée  $\varepsilon_{zz}$  en fonction de l'angle  $\phi$  entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement. Pour un matériau isotrope déformé plastiquement, les ratios  $\varepsilon_{xx}/\varepsilon_{zz}$  et  $\varepsilon_{yy}/\varepsilon_{zz}$  sont égaux à -0,5. Si l'un des ratios est égal à -1 et l'autre à 0, un état de déformation plane est observé. Sur cette courbe, à partir de  $\phi=75^\circ$ , la déformation est isotrope. Pour  $\phi < 75^\circ$ , un état de déformation plane est observé.

Cette transition entre modes de déformation s'observe nettement en analysant l'évolution présentée en Figure 3.8 du ratio entre les déformations transverses et la déformation appliquée, soit  $\varepsilon_{xx}/\varepsilon_{zz}$  et  $\varepsilon_{yy}/\varepsilon_{zz}$ , en fonction de  $\phi$ .

Pour  $\phi$  compris entre  $0^\circ$  et  $10^\circ$ ,  $\varepsilon_{xx}/\varepsilon_{zz} \approx -1$  (points verts), c'est le mode mixte qui domine et la déformation est plane. Pour  $\phi$  compris entre  $10^\circ$  et  $75^\circ$ , maintenant  $\varepsilon_{xx}/\varepsilon_{zz} \approx 0$ , mais  $\varepsilon_{yy}/\varepsilon_{zz} \approx -1$  (points violets) : c'est le mode longitudinal qui domine. Enfin, pour  $\phi$  entre  $75^\circ$  et  $90^\circ$   $\varepsilon_{xx}/\varepsilon_{zz} \approx -0,5$  et  $\varepsilon_{yy}/\varepsilon_{zz} \approx -0,5$ . C'est le mode transverse qui domine, et l'on se rapproche d'une déformation isotrope.

Pour  $\phi = 10^\circ$ , le changement net des valeurs de ratio indique une transition soudaine entre le mode mixte et le mode longitudinal. À l'inverse, la transition du mode longitudinal vers le mode transverse est plus progressive.

La validation du modèle multicouche passe par la modélisation de ces résultats sur monocristaux et la capture des caractéristiques principales du comportement. C'est ce qui a été fait systématiquement pour les autres approches employées dans la littérature [Lebensohn et al., 1998, Werwer and Cornec, 2000, Zambaldi et al., 2011].

### 3.3.2 Définition du multicouche & des systèmes de glissement

On considère dans ce travail un multicouche composé d'une lamelle  $\alpha_2$  et de six lamelles  $\gamma$ , soit une lamelle par variant d'orientation. On rappelle qu'il n'existe au sein d'une colonie



Lamelles $\gamma$			
Mode de déformation	Longitudinal (L)	Mixte (M)	Transverse (T)
Dislocation ordinaire	$(111)[\bar{1}10]$	$(11\bar{1})[\bar{1}10]$	$(1\bar{1}1)[110], (1\bar{1}\bar{1})[110], (1\bar{1}\bar{1})[110]$
Superdislocation	-	$(\bar{1}11)[0\bar{1}1], (1\bar{1}1)[\bar{1}01]$	-
Maclage	$(111)[11\bar{2}]$	-	$(11\bar{1})[112], (1\bar{1}1)[1\bar{1}\bar{2}], (1\bar{1}\bar{1})[1\bar{1}\bar{2}]$
Lamelle $\alpha_2$			
Prismatique	-	$(10\bar{1}0)[1\bar{2}10], (01\bar{1}0)[2\bar{1}\bar{1}0], (\bar{1}100)[11\bar{2}0]$	-
Pyramidal	-	-	$(\bar{1}2\bar{1}1)[\bar{1}2\bar{1}\bar{6}], (1\bar{1}\bar{1}1)[2\bar{1}\bar{1}\bar{6}], (11\bar{2}1)[11\bar{2}\bar{6}],$ $(1\bar{2}11)[1\bar{2}1\bar{6}], (2\bar{1}11)[211\bar{6}], (\bar{1}121)[\bar{1}1\bar{2}\bar{6}]$

TABLEAU 3.5 – Systèmes de glissement considérés dans les lamelles  $\gamma$  et la lamelle  $\alpha_2$  composant le multicouche.

lamellaire qu’une seule orientation possible pour les lamelles  $\alpha_2$ . La fraction volumique  $f_{\alpha_2}$  est choisie comme une moyenne de différentes caractérisations microstructurales disponibles dans la littérature [Umakoshi et al., 1995, Umeda et al., 1997, Edwards et al., 2018, Schnabel et al., 2019] : on choisit donc  $f_{\alpha_2} = 8\%$ . De même, des mesures expérimentales ont montré que les différents variants de lamelles  $\gamma$  sont présents dans des proportions équivalentes [Zghal et al., 1997]. On considère alors la même fraction volumique pour tous les variants avec  $f_{\gamma} = 15,3\%$ .

La classification des systèmes par mode de déformation proposée par [Lebensohn et al., 1998] est utilisée. Les travaux de [Werwer and Cornec, 2006, Cornec et al., 2015] ont montré que cette classification peut être enrichie en contrôlant l’activité cristalline associée. En effet, comme expliqué au chapitre 1 et dans le cas de la phase  $\gamma$  globulaire, les superdislocations contribuent peu, voire pas du tout, à la déformation. Les auteurs cités précédemment ont étudié le rôle de celles-ci sur la modélisation du comportement des colonies lamellaires. Ils ont montré qu’elles sont nécessaires dans le modèle uniquement pour le mode mixte (i.e. sans elles, le mode mixte n’est pas correctement modélisé).

Sur la base de ce résultat, les superdislocations sont supprimées sauf pour le mode mixte. Afin de rester cohérent avec les choix faits pour la phase  $\gamma$  globulaire, le maclage est considéré comme un système de glissement classique et non unidirectionnel.

En ce qui concerne la phase  $\alpha_2$ , les différentes analyses MET réalisées sur monocolonies PST et alliages lamellaires classiques montrent que le glissement basal n’est jamais observé [Inui et al., 1993, Kishida et al., 1998, Wiezorek et al., 1997]. On ne le considère donc pas dans le modèle de plasticité cristalline.

En résumé, le multicouche est composé de sept lamelles, une pour chaque phase et orientation rencontrée dans la structure lamellaire. Les systèmes de glissement considérés dans les différentes lamelles sont indiqués dans le Tableau 3.5. Concrètement, dans un calcul éléments finis, en chaque point d’intégration, la loi matériau sera intégrée sept fois, au lieu d’une fois pour un calcul classique (voir Figure 3.12).

### 3.3.3 Définition des paramètres à identifier à partir des essais sur monocristaux

On souhaite reproduire les travaux des publications précédemment citées afin de valider la capacité du modèle multicouche à modéliser le comportement des monocolonies PST, et donc par extension des colonies lamellaires. On se place donc dans des conditions comparables à celles d’autres travaux de la littérature en utilisant à ce stade une loi d’érouissage isotrope.

Un jeu de paramètres est associé à chaque mode de déformation (longitudinal, mixte, transverse) comme indiqué dans le Tableau 3.6. Trois cisssions critiques sont à identifier pour la phase  $\gamma$  :  $\tau_0^{lo}$ ,  $\tau_0^{mi}$  et  $\tau_0^{tr}$ . Pour la phase  $\alpha_2$ , on utilise les mêmes que celles de la phase monolithique comme première approximation :  $\tau_0^{pr} = 100$  MPa et  $\tau_0^{py} = 910$  MPa.

Trois paramètres  $H$  pour les écrouissages isotropes sont à identifier ( $H^{lo}$ ,  $H^{mi}$ ,  $H^{tr}$ ), un pour chaque mode. Dans la même volonté de comparaison, on utilise une matrice d'écrouissage  $h_{\alpha\beta} = 1$  comme dans [Werwer and Cornec, 2000, Werwer and Cornec, 2006, Kabir et al., 2010, Cornec et al., 2015].

Les tenseurs d'élasticité utilisés sont les mêmes que ceux utilisés pour les phases monolithiques (voir section 3.2). En ce qui concerne la sensibilité aux effets de vitesse de déformation, il a été montré expérimentalement que les monocolonies PST sont quasiment insensibles aux effets de vitesse [Parthasarathy et al., 1998]. Alors, on utilise  $n^{lam} = 15$  et  $K^{lam} = 1$ .

Mode de déformation	Longitudinal (L)	Mixte (M)	Transverse (T)
$\gamma$			
Dislocation ordinaire	$\tau_0^{lo}, H^{lo}$	$\tau_0^{mi}, H^{mi}$	$\tau_0^{tr}, H^{tr}$
Superdislocation	-	$\tau_0^{mi}, H^{mi}$	-
Maclage	$\tau_0^{lo}, H^{lo}$	-	$\tau_0^{tr}, H^{tr}$
$\alpha_2$			
Prismatique	-	$H^{mi}$	-
Pyramidal	-	-	$H^{tr}$

TABLEAU 3.6 – Jeu de paramètres à identifier pour la modélisation du comportement en compression des monocolonies PST.

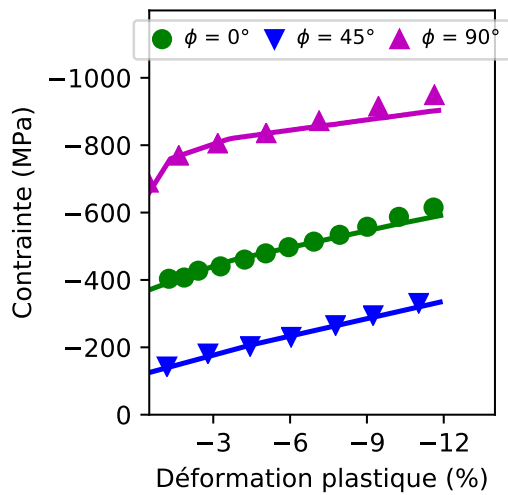
### 3.3.4 Résultats & discussion

On réalise une identification inverse des paramètres à partir des résultats expérimentaux présentés en Figure 3.6. Les paramètres pour le mode longitudinal sont identifiés à partir de l'essai à  $\phi = 45^\circ$ , ceux du mode transverse à partir de l'essai à  $\phi = 90^\circ$ , puis ceux du mode mixte à partir de l'essai à  $\phi = 0^\circ$ . Des simulations sont ensuite réalisées pour  $\phi$  allant de  $0^\circ$  à  $90^\circ$  afin d'évaluer les capacités du modèle à reproduire le comportement et capturer l'anisotropie plastique. Les paramètres du modèle sont indiqués dans le Tableau 3.7.

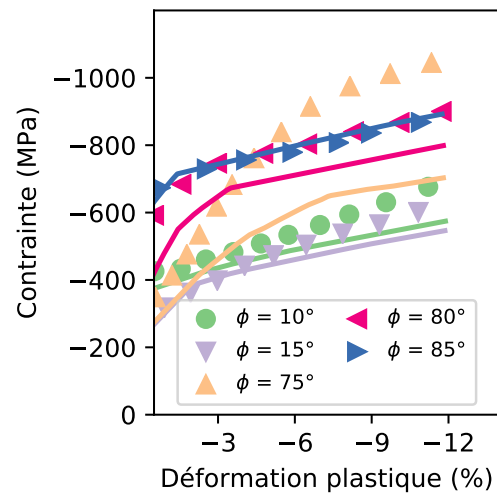
$\tau_0^{lo}$	$H^{lo}$	$\tau_0^{mi}$	$H^{mi}$	$\tau_0^{tr}$	$H^{tr}$	$\tau_0^{pr}$	$\tau_0^{py}$
51	400	150	700	165	200	100	910

TABLEAU 3.7 – Paramètres du modèle de plasticité cristalline identifiés pour les monocolonies PST (rouge = paramètres identifiés, vert = paramètres fixés). Les paramètres sont en MPa.  $lo$ ,  $mi$  et  $tr$  désignent respectivement le mode *longitudinal*, le mode *mixte* et le mode *transverse*.  $\tau_0^{pr}$  et  $\tau_0^{py}$  sont issues des mesures expérimentales de [Inui et al., 1993].

Les comparaisons simulations-expériences des courbes contrainte-déformation sont présentées en Figure 3.9. Logiquement, les essais à partir desquels l'identification inverse est réalisée sont fidèlement reproduits (Figure 3.9a). La comparaison simulation-expérience pour des angles situés aux frontières entre les domaines de déformation permet de tester le modèle. Pour  $\phi = 10^\circ, 15^\circ, 85^\circ$ , le modèle reproduit correctement les résultats expérimentaux. Pour  $\phi = 80^\circ$ , l'évolution est cohérente mais le niveau de contrainte prédit par la simulation est inférieur à celui observé expérimentalement. Enfin, pour  $\phi = 75^\circ$ , le modèle prédit la bonne limite d'élasticité, mais pas l'écrouissage important observé expérimentalement. En effet, le modèle tient peu compte des interactions entre les systèmes de glissement des différents modes (la matrice d'écrouissage est unitaire), alors que pour cette orientation, cette interaction s'avère primordiale.



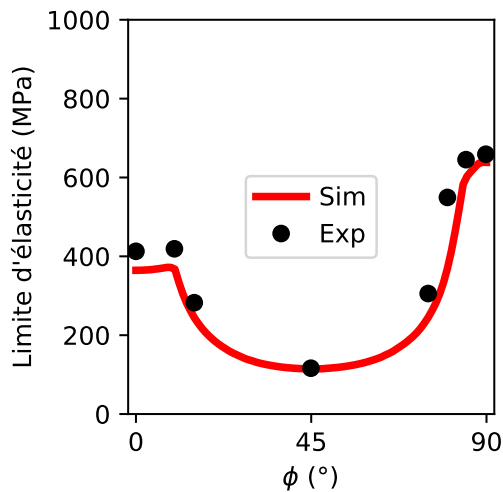
(a) Résultats sur les essais utilisés pour l'identification des paramètres.



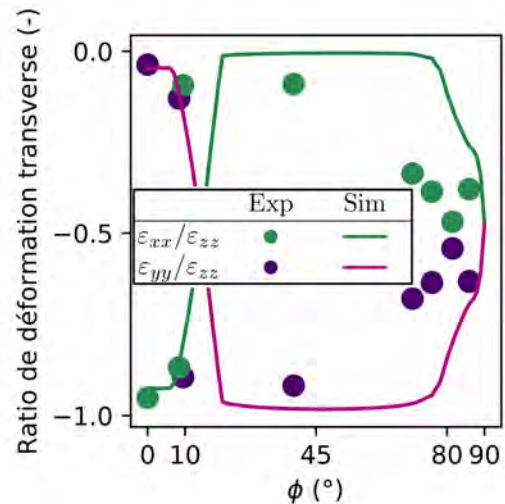
(b) Prédiction du modèle pour des angles  $\phi$  à la frontière entre les modes de déformation.

FIGURE 3.9 – Comparaison simulation-expérience du comportement en compression des monoclonies PST. Les traits continus correspondent à la simulation, les points aux résultats expérimentaux.  $\phi$  est l'angle entre l'axe de chargement et le plan d'interface lamellaire.

Ce dernier point a été observé ailleurs dans la littérature [Werwer and Cornec, 2006]. Récemment, [Schnabel et al., 2019] ont montré que le comportement pour cet angle à la frontière entre les modes longitudinal et transverse peut être amélioré en calibrant manuellement une matrice d'érouissage. Comme par la suite nous ne nous intéressons qu'à des sollicitations en petites déformations, ce point n'a pas été approfondi.



(a) Évolution de la limite d'élasticité en fonction de l'angle  $\phi$ .



(b) Évolution du ratio entre les déformations transverses et la déformation appliquée. Voir Figure 3.8 pour plus d'informations.

FIGURE 3.10 – Comparaison simulation-expérience du comportement en compression des monoclonies PST. L'angle  $\phi$  correspond à l'angle entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement. Les courbes sont tracées à partir des résultats de 91 calculs (un par angle).

L'évolution de la limite d'élasticité en fonction de l'angle  $\phi$  est présentée en Figure 3.10a.

La forme en U caractéristique est retrouvée : l'anisotropie des monocolonies est capturée par le modèle. Enfin, on observe sur la [Figure 3.10b](#) que le modèle prédit les transitions entre les modes de déformation et l'état de déformation plane ou isotrope correspondant. Néanmoins, la valeur des ratios est surestimée lors de la transition mode longitudinal-mode transverse ( $\phi = 80^\circ$ ).

Ce dernier point est observé dans tous les travaux de la littérature [[Lebensohn et al., 1998](#), [Werwer and Cornec, 2000](#), [Zambaldi et al., 2011](#)], et ce même lorsque l'interaction entre les systèmes des différents modes est considérée [[Schnabel et al., 2019](#)].

En conclusion, la combinaison du modèle multicouche et du modèle de plasticité cristalline permet de simuler avec succès le comportement des colonies lamellaires. Pour remettre dans le contexte de l'étude bibliographique ([chapitre 1](#)), le niveau de description intermédiaire employé ici donne des résultats équivalents à ceux d'autres niveaux de description (par exemple [[Lebensohn et al., 1998](#), [Werwer and Cornec, 2000](#), [Zambaldi et al., 2011](#), [Schnabel et al., 2019](#)]). Pour aller plus loin, une comparaison approfondie entre différentes approches pourraient être réalisée.

### 3.3.5 Transfert des paramètres vers le cas du polycristal et à 750 °C

La modélisation du comportement des monocolonies PST a permis d'identifier un premier jeu de paramètres. Ces paramètres ne peuvent pas être conservés tels quels pour décrire le comportement des colonies lamellaires dans un polycristal. Ils doivent être ajustés pour tenir compte de la variation des propriétés associées à la composition de l'alliage, au procédé de fabrication, à la déformation dans un environnement contraint (voir [[Paidar and Yamaguchi, 2007](#)]), et au changement d'échelle.

La méthode utilisée pour ajuster les paramètres varie dans la littérature. [[Brockman, 2003](#)] et [[Zambaldi et al., 2011](#)] ont choisi d'ajuster empiriquement les cisssions critiques ce qui modifie la profondeur de la courbe en U de l'évolution de la limite d'élasticité. [[Cornec et al., 2015](#)] ont choisi d'ajuster les cisssions critiques et les écrouissages identifiés sur monocolonie en leur appliquant un facteur. Ce facteur est à identifier à partir des résultats d'essais macroscopiques sur la microstructure d'intérêt.

On a montré ici, via les résultats présentés en [Figure 3.6b](#), que la forme du U était au final peu modifiée que l'on soit sur une colonie lamellaire d'une microstructure ou sur une monocolonie PST. On souhaite donc conserver l'anisotropie plastique identifiée sur monocolonie lors du passage au cas du polycristal. On définit alors des ratios d'anisotropie à 20 °C tels que :

$$\frac{\tau_0^{mi,20^\circ C}}{\tau_0^{lo,20^\circ C}} = 2,94 \quad ; \quad \frac{\tau_0^{tr,20^\circ C}}{\tau_0^{lo,20^\circ C}} = 3,24 \quad (3.21)$$

En conservant ces ratios constants, les niveaux de contrainte peuvent être modifiés tout en conservant l'anisotropie plastique. Alors, pour ajuster la taille du domaine élastique à l'échelle macroscopique, on définit un paramètre  $\psi^{20^\circ C}$  tel que :

$$\tau_{0,lam}^{lo,20^\circ C} = \psi^{20^\circ C} \times \tau_{0,PST}^{lo,20^\circ C} \quad ; \quad \tau_{0,lam}^{mi,20^\circ C} = \psi^{20^\circ C} \times \tau_{0,PST}^{mi,20^\circ C} \quad ; \quad \tau_{0,lam}^{tr,20^\circ C} = \psi^{20^\circ C} \times \tau_{0,PST}^{tr,20^\circ C} \quad (3.22)$$

Les résultats présentés sont obtenus à 20 °C. Or, nous souhaitons aussi modéliser le comportement des alliages TiAl à microstructure lamellaire à 750 °C.

[[Inui et al., 1995](#)] ont étudié l'évolution de la limite d'élasticité de monocolonies PST pour les trois angles  $\phi$  (angle entre l'axe de chargement et le plan d'interface lamellaire) caractéristiques en fonction de la température. Leurs résultats sont présentés en [Figure 3.11a](#). Pour le mode transverse ( $\phi = 90^\circ$ ), la limite d'élasticité diminue de façon significative avec la température : l'anisotropie plastique est modifiée à 750 °C.

En conséquence, le ratio d'anisotropie est ajusté à 750 °C (points en noir sur la [Figure 3.11a](#)) tel que :

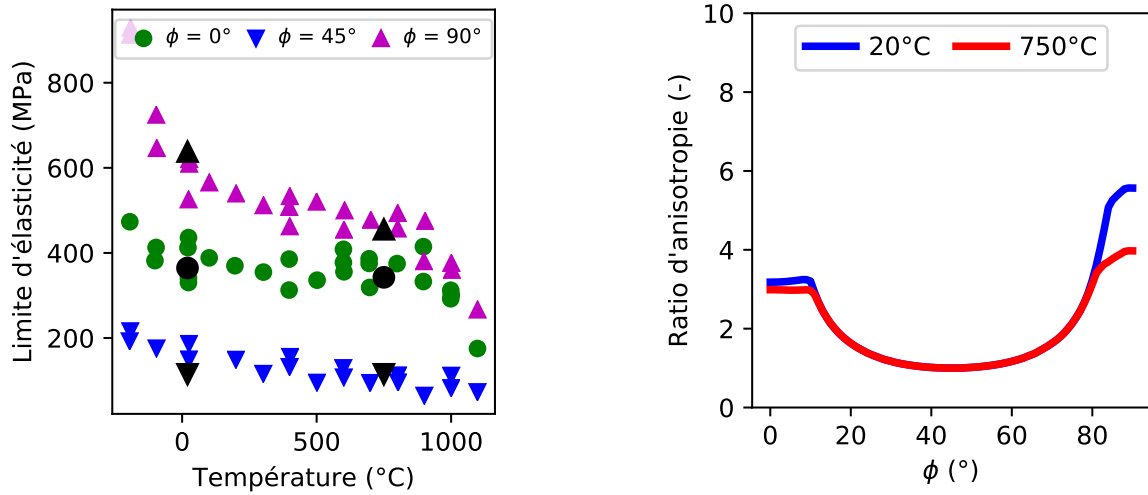
$$\frac{\tau_0^{mi,750^\circ\text{C}}}{\tau_0^{lo,750^\circ\text{C}}} = 2,94 \quad ; \quad \frac{\tau_0^{tr,750^\circ\text{C}}}{\tau_0^{lo,750^\circ\text{C}}} = 0,7 \left( \frac{\tau_0^{tr,20^\circ\text{C}}}{\tau_0^{lo,20^\circ\text{C}}} \right) = 2,26 \quad ; \quad \tau_0^{py,750^\circ\text{C}} = 0,7(\tau_0^{py,20^\circ\text{C}}) \quad (3.23)$$

Seul le ratio entre les modes transverse et longitudinal est modifié ( $\tau_0^{py,750^\circ\text{C}}$  appartient au mode transverse aussi et ne doit pas être oubliée). On a donc :

$$\tau_{0,lam}^{lo,750^\circ\text{C}} = \psi^{750^\circ\text{C}} \times \tau_{0,PST}^{lo,750^\circ\text{C}} \quad ; \quad \tau_{0,lam}^{mi,750^\circ\text{C}} = \psi^{750^\circ\text{C}} \times \tau_{0,PST}^{mi,750^\circ\text{C}} \quad ; \quad \tau_{0,lam}^{tr,750^\circ\text{C}} = \psi^{750^\circ\text{C}} \times \tau_{0,PST}^{tr,750^\circ\text{C}} \quad (3.24)$$

Comme précédemment, la taille du domaine élastique est modifiée à l'aide d'un facteur  $\psi^{750^\circ\text{C}}$  à identifier.

La comparaison entre l'anisotropie à 20 °C et 750 °C est présentée en Figure 3.11b. Une nette diminution du ratio d'anisotropie pour  $\phi > 80^\circ$  est observée. La réalisation de simulations sur polycristaux permettra de déterminer l'impact de cette diminution sur les champs mécaniques locaux.



(a) Évolution de la limite d'élasticité en fonction de la température pour différents  $\phi$ . Les points noirs correspondent aux limites prévues par le modèle.

(b) Évolution du ratio d'anisotropie en fonction de l'angle  $\phi$  à 20 °C et 750 °C.

FIGURE 3.11 – Ajustement du ratio d'anisotropie avec la température. Les données expérimentales en Figure 3.11a sont tirées de [Inui et al., 1995].

$\tau_{0,PST}^{lo,20^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{mi,20^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{pr,20^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{tr,20^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{py,20^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{lo,750^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{mi,750^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{pr,750^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{tr,750^\circ\text{C}}$	$\tau_{0,PST}^{py,750^\circ\text{C}}$
51	150	100	165	910	51	150	100	115.5	637

TABLEAU 3.8 – Résumé des cisssions critiques identifiées grâce au travail sur les monocolonies PST. Les données sont en MPa.

Les cisssions critiques identifiées grâce au travail sur monocolonies PST sont indiquées dans le Tableau 3.8. De cinq cisssions critiques à identifier par température, on passe donc à un seul paramètre  $\psi^{20^\circ\text{C}}$  ou  $\psi^{750^\circ\text{C}}$  pour la modélisation des colonies lamellaires dans un polycristal.

En ce qui concerne l'écroissage, il ne semble pas possible de suivre la même approche qu'avec les cisssions critiques. En effet, l'écroissage observé expérimentalement sur les monocolonies est très variable dans les différents travaux de la littérature (voir par exemple [Inui

et al., 1995], [Umeda et al., 1997], [Uhlenhut, 1999], ou [Parthasarathy et al., 1998]). Une petite modification dans la structure (espacement lamellaire, composition chimique) modifie significativement le comportement observé. De plus, nous avons montré au chapitre 2 que l'écroissage observé sur les polycristaux lamellaires dans le cas de sollicitations cycliques est cinématique et non isotrope : transférer l'écroissage isotrope identifié ici n'est donc pas pertinent. On rappelle qu'initialement, l'écroissage isotrope a été utilisé pour la modélisation du comportement monotone des monocolonies PST afin de pouvoir comparer les résultats du modèle multicouche avec ceux de la littérature.

À l'échelle du polycristal lamellaire, on utilisera donc un écroissage cinématique classique dont la loi d'évolution est pilotée par deux paramètres à identifier :  $(c, d)^{lam}$ . Le même écroissage est appliqué à tous les modes de déformation car il n'y a pas, à ce stade, d'élément qui mette en évidence une anisotropie de l'écroissage. Le Tableau 3.9 résume les différentes attributions des paramètres lors du passage au cas du polycristal.

Comme pour les phases monolithiques, les tenseurs d'élasticité de toutes les lamelles du multicouche seront ajustés de façon commune au besoin avec un facteur  $\psi_{el}^{lam}$ .

Pour conclure, il est intéressant de comparer la démarche employée ici au cas des alliages de titane ( $\alpha + \beta$ ) [Mayeur and McDowell, 2007, Zhang et al., 2007, Smith et al., 2018]. Pour tenir compte de la structure lamellaire, le principe de ratio d'anisotropie est également utilisé. Ces ratios sont définis de façon purement empirique. Dans notre cas, la modélisation du comportement des monocolonies permet de donner une base micromécanique aux ratios utilisés.

Lamelles $\gamma$			
Mode de déformation	Longitudinal (L)	Mixte (M)	Transverse (T)
Dislocation ordinaire	$\tau_{0,lam}^{lo}, c, d$	$\tau_{0,lam}^{mi}, c, d$	$\tau_{0,lam}^{tr}, c, d$
Superdislocation	-	$\tau_{0,lam}^{mi}, c, d$	-
Maclage	$\tau_{0,lam}^{lo}, c, d$	-	$\tau_{0,lam}^{tr}, c, d$
Lamelle $\alpha_2$			
Prismatique	-	$\tau_{0,lam}^{pr}, c, d$	-
Pyramidal	-	-	$\tau_{0,lam}^{py}, c, d$

TABLEAU 3.9 – Attribution des cissions critiques et des écroissages lors du passage au cas du polycristal lamellaire. Le passage de  $\tau_{0,PST}$  à  $\tau_{0,lam}$  se fait au travers de l'Équation 3.22, de l'Équation 3.24, et des valeurs indiquées dans le Tableau 3.8.

### 3.4 Résumé des points principaux

Le modèle de plasticité cristalline utilisé par la suite pour évaluer la plasticité a été présenté. Les systèmes de glissement et les différents paramètres à identifier pour les phases monolithiques ( $\gamma, \alpha_2, \beta_0$ ) ont été définis en section 3.2. Les paramètres sont résumés dans le Tableau 3.10 et le Tableau 3.11 avec leurs rôles respectifs dans la modélisation.

La transition d'échelle utilisée pour évaluer la plasticité à l'échelle des lamelles dans une colonie lamellaire a été détaillée. L'approche est validée via la modélisation du comportement de monocolonies lamellaires. Ce travail a permis de capturer l'anisotropie plastique des colonies lamellaires via la définition de ratios d'anisotropie à 20 °C et 750 °C. Ainsi, à l'échelle du polycristal, au lieu d'avoir cinq cissions critiques à déterminer par température, un seul facteur  $\psi$  doit être identifié. Les différents paramètres et leurs rôles sur la modélisation sont résumés dans le Tableau 3.12. Le lien entre les cissions critiques identifiées sur monocolonie (Tableau 3.8),  $\psi$ ,

Grains $\gamma$						
Paramètre	$\phi_{el}^\gamma$ (-)	$\tau_0^\gamma$ (MPa)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)	$n$ (-)	$K$ (MPa)
Rôle	Élasticité	Taille du domaine élastique	Écrouissage		Effets de vitesse	

TABLEAU 3.10 – Résumé des paramètres à identifier pour les grains  $\gamma$  monolithiques à 20 °C et 750 °C.

et les cisssions critiques des colonies lamellaires dans un polycristal lamellaire se fait au travers de l'Équation 3.22 et de l'Équation 3.24.

Grains $\alpha_2$ et $\beta_0$				
Paramètre	$\phi_{el}^{\alpha_2}$ (-)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)	$E_{\beta_0}$ (GPa)
Rôle	Élasticité	Écrouissage		Élasticité

TABLEAU 3.11 – Résumé des paramètres à identifier pour les grains  $\alpha_2$  et  $\beta_0$  monolithiques à 20 °C et 750 °C.

Colonies lamellaires				
Paramètre	$\phi_{el}^{lam}$ (-)	$\psi$ (-)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)
Rôle	Module d'Young macroscopique	Taille du domaine élastique (voir Équation 3.22, Équation 3.24 et Tableau 3.8)	Écrouissage	

TABLEAU 3.12 – Résumé des paramètres à identifier pour les colonies lamellaires à 20 °C et 750 °C.

Le schéma proposé en Figure 3.12 résume le fonctionnement du modèle lors de la réalisation de calculs sur des microstructures contenant des grains globulaires et/ou des colonies lamellaires.

La microstructure est maillée par éléments finis. Sur la figure, le maillage est réalisé avec des éléments cubiques. Chaque grain, identifié ici par des couleurs, est considéré comme un monocristal avec une orientation cristalline propre et homogène. Les déplacements aux joints de grain sont continus. De fait, les joints de grains n'ont pas de propriétés particulières, mais des discontinuités de contrainte apparaissent naturellement.

Si un point d'intégration du maillage éléments finis se situe dans un grain globulaire, la plasticité est évaluée directement via le modèle de plasticité cristalline tel que présenté en sous-section 3.1.2.

Dans le cas où des colonies lamellaires sont présentes, on ne décrit pas explicitement les lamelles. Celles-ci sont considérées au travers de la transition d'échelle présentée précédemment. Le temps de calcul augmente significativement, car au lieu d'utiliser une seule fois le modèle de plasticité cristalline, on l'utilise  $Nb_{lam}$  fois.

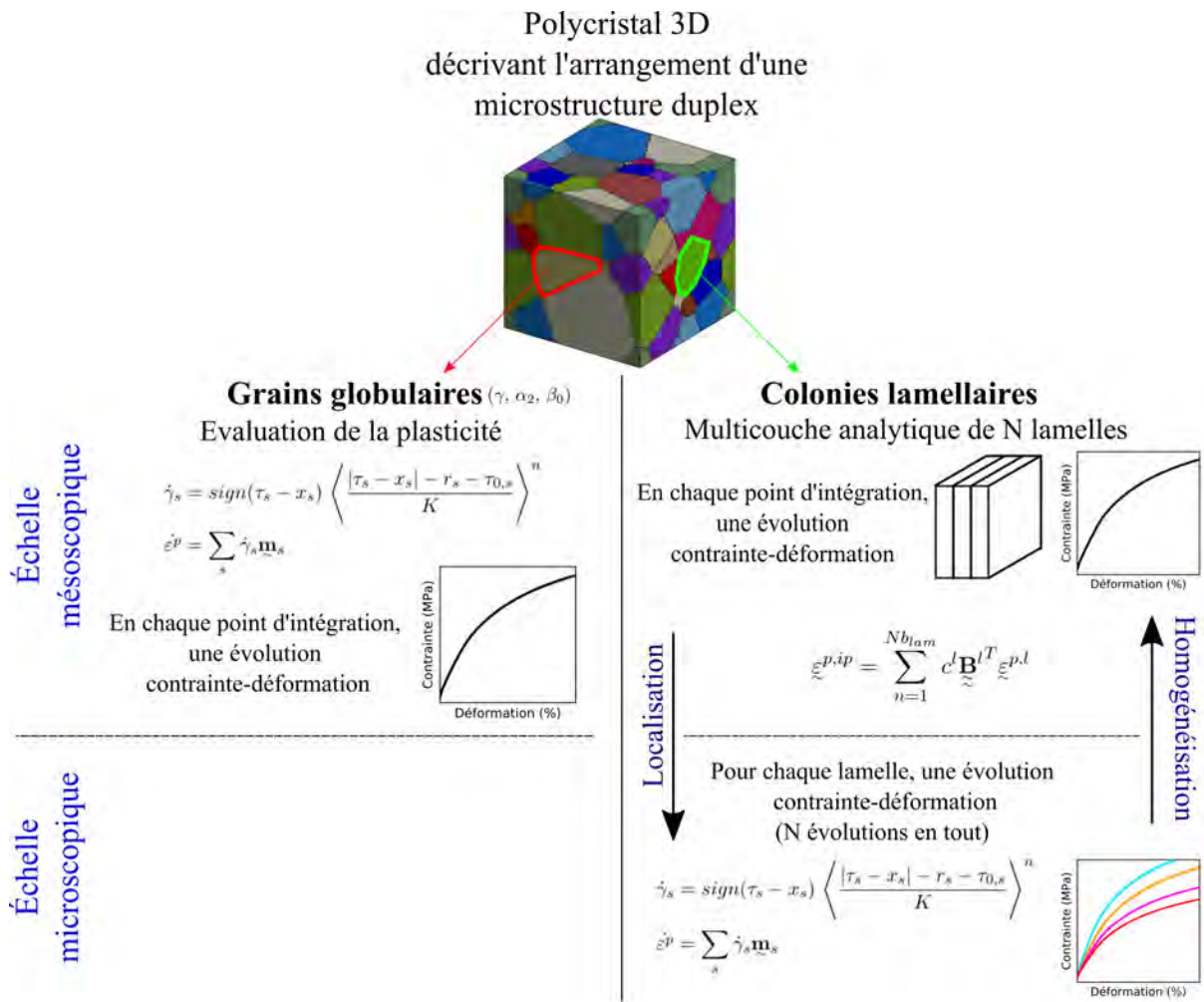


FIGURE 3.12 – Schéma résumant le fonctionnement du modèle de plasticité cristalline et/ou de la transition d'échelle au cours d'un calcul éléments finis sur microstructure. Les couleurs sur la microstructure indiquent les différents grains. Les significations des grandeurs des équations sont présentées dans le texte en section 3.1.





## Chapitre 4

# Modélisation du comportement mécanique des alliages TiAl par calcul éléments finis sur microstructure et homogénéisation numérique

### Résumé :

L'objectif de ce chapitre est de modéliser le comportement mécanique des microstructures génériques des alliages TiAl par calcul éléments finis sur microstructure et homogénéisation numérique. Une méthodologie d'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline à partir de courbes contrainte-déformation macroscopiques est suivie. En premier lieu, un des essais micromécaniques présenté au chapitre 2 est modélisé afin de s'assurer d'une cohérence entre les champs mécaniques locaux obtenus par calcul et ceux mesurés expérimentalement. Ensuite, la démarche est appliquée pour modéliser le comportement mécanique des quatre microstructures génériques à 20 °C et 750 °C.

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Génération de microstructures virtuelles &amp; calcul sur microstructures . . . . .</b>	<b>113</b>
4.1.1	Génération de microstructures virtuelles avec Neper . . . . .	113
4.1.2	Homogénéisation numérique : conditions limites & maillage . . . . .	114
4.1.3	Définition de la taille du VER . . . . .	115
<b>4.2</b>	<b>Modélisation des essais micromécaniques . . . . .</b>	<b>116</b>
4.2.1	Identification des paramètres par calcul éléments finis et homogénéisation numérique . . . . .	117
4.2.2	Modèle éléments finis de l'éprouvette : maillage & conditions aux limites	119
4.2.3	Résultats & discussion . . . . .	121
4.2.4	Remarque concernant le comportement des grains $\gamma$ . . . . .	125
<b>4.3</b>	<b>Modélisation du comportement des quatre microstructures génériques . . . . .</b>	<b>125</b>
4.3.1	Génération des microstructures statistiquement représentatives . . . . .	125
4.3.2	Modélisation du comportement cyclique : identification des paramètres .	129
4.3.2.1	Démarche proposée pour l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline . . . . .	129
4.3.2.2	Résultats . . . . .	130
4.3.3	Discussion & perspectives . . . . .	136
<b>4.4</b>	<b>Synthèse des résultats . . . . .</b>	<b>137</b>

---

## Démarche & méthodologie

L'objectif est de modéliser le comportement mécanique des quatre microstructures génériques des alliages TiAl à l'aide d'une approche multi-échelles. La méthode utilisée est schématisée en Figure 4.1.

Une microstructure virtuelle dite statistiquement représentative de la microstructure étudiée est générée et maillée par éléments finis. Les champs locaux de contrainte  $\sigma(\underline{x})$  et de déformation  $\varepsilon(\underline{x})$  pour une sollicitation mécanique donnée sont ensuite calculés par éléments finis. Le comportement des grains dans la microstructure est obtenu via le modèle de plasticité défini précédemment (chapitre 3). Une homogénéisation numérique est alors réalisée.

L'homogénéisation numérique consiste à moyenniser les champs de contrainte  $\langle \sigma \rangle$  et de déformation  $\langle \varepsilon \rangle$  sur la microstructure étudiée afin d'obtenir la courbe contrainte-déformation macroscopique associée. Une identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline peut alors être réalisée en comparant la courbe contrainte-déformation numérique à la courbe expérimentale. Les paramètres optimaux sont ceux qui permettent d'obtenir la meilleure corrélation entre ces deux courbes. Une fois l'identification réalisée, les champs mécaniques correspondant dans la microstructure pourront être analysés.

L'identification des paramètres du modèle se base donc sur une vision macroscopique, là où dans d'autres approches ceux-ci sont directement ajustés à partir de mesures de champs expérimentales (voir chapitre 1). Il est donc nécessaire de vérifier que les champs locaux obtenus numériquement à partir d'une identification macroscopique sont proches de ceux observés expérimentalement en modélisant un des essais micromécaniques réalisés au chapitre 2.

Le chapitre est organisé en trois sections. Dans la section 4.1, les outils utilisés pour générer les microstructures et les paramètres des calculs éléments finis (conditions aux limites) sont présentés. La taille du Volume Élémentaire Représentatif (VER) est définie via la réalisation d'une étude préliminaire.

Dans la section 4.2, la démarche présentée en Figure 4.1 est validée en modélisant les résultats d'un essai micromécanique réalisé précédemment. Pour remettre dans le contexte de l'étude bibliographique, il s'agit ici de la première confrontation d'une modélisation du comportement des colonies lamellaires à des mesures de champs expérimentales.

Enfin, la section 4.3 traite de l'application de la démarche d'identification aux quatre microstructures génériques des alliages TiAl. On montre qu'en tenant compte des caractéristiques des microstructures aux différentes étapes, les paramètres obtenus ont une base micromécanique intéressante.

Les calculs éléments finis sont tous réalisés avec la suite Z-set [Zset-Software, 1996].

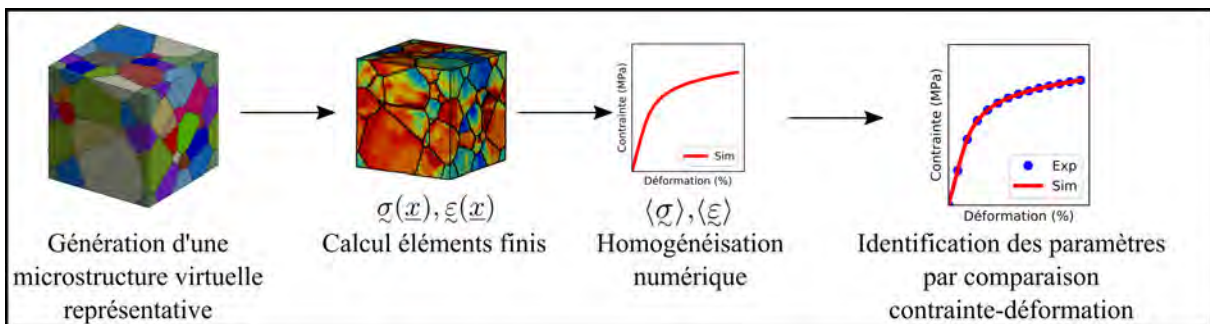


FIGURE 4.1 – Schéma représentant la démarche suivie pour la modélisation du comportement mécanique par calcul éléments finis sur microstructure et homogénéisation numérique.

## 4.1 Génération de microstructures virtuelles & calcul sur microstructures

### 4.1.1 Génération de microstructures virtuelles avec Neper

Neper est un logiciel open-source qui permet la génération de microstructures virtuelles [Quey et al., 2011, Quey et al., 2018, Quey and Renversade, 2018]. Le principe général repose sur la tessellation, c'est-à-dire le pavage d'un espace à partir d'un ensemble discret de points appelés germes. Neper peut être utilisé afin de reconstruire des microstructures exactes à partir de données obtenues grains par grains (typiquement issues d'une campagne expérimentale au synchrotron), ou de générer des microstructures statistiquement représentatives.

La génération des microstructures statistiquement représentatives se fait à partir de lois statistiques décrivant les distributions de taille et de forme de grains. Lorsque l'on parle de microstructures statistiquement représentatives, on parle donc d'une représentativité uniquement vis-à-vis de ces deux caractéristiques.

Les données d'entrée sont les lois statistiques représentant les distributions expérimentales de taille de grains et de sphéricité. Il est admis que ces caractéristiques microstructurales suivent des lois log-normales [Spetl et al., 2014]. Soit  $\mu$  et  $\sigma$  respectivement l'espérance et l'écart type du logarithme de la variable considérée, alors la loi log-normale admet pour densité de probabilité :

$$f(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.1)$$

pour  $x > 0$ .

La taille des grains est discutée au travers de la notion de diamètre équivalent. Cette grandeur correspondant au diamètre de la sphère (respectivement du cercle) de même volume (respectivement de même surface) que le grain [Quey et al., 2011]. On définit  $D_{eqV}$  et  $D_{eqS}$ , le diamètre équivalent en volume et le diamètre équivalent en surface :

$$D_{eqV} = \sqrt[3]{\frac{6V_p}{\pi}} \quad ; \quad D_{eqS} = \sqrt{\frac{S_p}{\pi}} \quad (4.2)$$

avec  $V_p$  et  $S_p$  le volume et la surface de la particule d'intérêt.

La sphéricité donne une indication sur la similarité de la forme d'un objet à une sphère. Son équivalent 2D est la circularité. La sphéricité  $S$  d'une particule ou sa circularité  $C$  sont définies comme :

$$S = \frac{\pi^{\frac{1}{3}}(6V_p)^{\frac{2}{3}}}{A_p} \quad ; \quad C = 4\pi\left(\frac{A_p}{P_p^2}\right) \quad (4.3)$$

avec  $V_p$ ,  $A_p$  et  $P_p$  respectivement le volume, l'aire de la surface et le périmètre de la particule.

Étant donné que l'on souhaite réaliser des calculs 3D et donc générer des microstructures en 3D, une caractérisation microstructurale 3D aurait été idéale. Différentes techniques expérimentales sont utilisées pour la réalisation de ce type de mesure dans la littérature, comme la découpe successive de la surface d'un échantillon au papier abrasif ou au FIB puis observation par EBSD [Signor et al., 2016, Groeber et al., 2008], ou encore la caractérisation par tomographie aux grands instruments [Proudhon et al., 2018]. Néanmoins, ces diverses méthodes sont lourdes à mettre en œuvre.

Le polissage successif est fastidieux ce qui le rend difficilement applicable au vu du nombre de microstructures étudiées ici. La découpe FIB et la tomographie, au delà de l'accès aux moyens expérimentaux et de l'expertise qu'elles exigent, ne sont ni adaptées aux différentes tailles de grains ou colonies rencontrées dans nos microstructures, ni à l'étude de microstructures contenant des colonies lamellaires [Geoffroy, 2013]. Ces structures lamellaires sont par ailleurs réfractaires

aux mesures par diffraction. Au sein d'une même colonie, la présence de multiples lamelles de différents variants  $\gamma$  fait qu'il est difficile d'identifier automatiquement les colonies. La réalisation de ce type de cartographie est possible mais demande le développement d'outils spécifiques [Héripré, 2006].

De facto, pour notre étude, des mesures 2D sont réalisées, celles-ci permettant d'obtenir des données statistiques suffisantes [Smith et al., 2018]. Pour la microstructure presque- $\gamma$ , une cartographie EBSD est effectuée. Pour les autres microstructures étudiées, un échantillon est poli au papier abrasif jusqu'à une granulométrie de  $0,25 \mu\text{m}$ , puis observé au MEB en BSE. Une centaine de micrographies permettant au minimum l'observation de 300 grains sont réalisées. Les images sont ensuite traitées sur le logiciel imageJ. Les grains/colonies sont détectés et entourés manuellement. Les diamètres équivalents et circularités correspondants sont mesurés directement sur imageJ. Les diamètres équivalents 2D sont légèrement ajustés par application d'une correction stéréologique [Ghosh et al., 2016, Russ and Dehoff, 2012]. Avec  $\langle D_{eq2D} \rangle$  le diamètre équivalent moyen mesuré en 2D, son équivalent en 3D  $\langle D_{eq3D} \rangle$  est obtenu par la relation :

$$\langle D_{eq3D} \rangle = \frac{4}{\pi} \langle D_{eq2D} \rangle \quad (4.4)$$

En ce qui concerne les circularités, les distributions obtenues sont élevées et quasiment identiques pour toutes les microstructures. Ces distributions sont aussi très proches de celle donnée par défaut par le logiciel Neper. C'est donc cette distribution de sphéricité par défaut disponible dans Neper, qui est tirée de mesures expérimentales avancées, que l'on utilisera par la suite.

Enfin, l'analyse de la texture du matériau est essentielle pour générer des microstructures représentatives [Lebensohn et al., 2008]. Néanmoins, le matériau d'intérêt ici étant obtenu par métallurgie des poudres, aucune texture n'est généralement présente [Héripré, 2006]. Pour s'en assurer, des mesures de l'angle apparent du plan d'interface lamellaire ont été réalisées dans le cas de la microstructure lamellaire. Si une texture avait été présente, une orientation privilégiée du plan d'interface apparent aurait alors été observée. Or, une distribution uniforme a été mesurée. En conséquence, des orientations uniformes sont générées avec Neper pour toutes les microstructures étudiées [Quey et al., 2018].

Pour finir, on précise donc que, pour une loi log-normale, différents arrangements statistiquement représentatifs peuvent être générés avec Neper en modifiant les germes initiaux de la tessellation. Ainsi, différents arrangements locaux statistiquement représentatifs d'une même microstructure peuvent être étudiés. Dans un souci de reproductibilité des résultats, les commandes utilisées pour générer les microstructures sur Neper seront indiquées.

#### 4.1.2 Homogénéisation numérique : conditions limites & maillage

L'objectif est de réaliser des calculs éléments finis sur des microstructures virtuelles suivies d'une homogénéisation numérique afin de décrire les évolutions contrainte-déformation macroscopiques correspondantes. Dans un modèle éléments finis d'une microstructure, chaque grain est considéré comme un monocristal avec une orientation cristalline propre et homogène, et les déplacements aux joints de grain sont dans notre cas continus.

On définit  $\underline{\varepsilon}$  comme le tenseur local des déformations (i.e. dans la microstructure), et  $\underline{\tilde{\varepsilon}}$  le tenseur macroscopique des déformations. Alors sur le volume  $V$  (la microstructure virtuelle) :

$$\langle \underline{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \underline{\varepsilon} dV = \underline{\tilde{\varepsilon}} \quad (4.5)$$

De même, le tenseur local des contraintes  $\underline{\sigma}$  et le tenseur macroscopique des contraintes  $\underline{\tilde{\sigma}}$  sont reliés par :

$$\langle \underline{\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \underline{\sigma} dV = \underline{\tilde{\sigma}} \quad (4.6)$$

Afin de réaliser l’homogénéisation numérique, un Volume Élémentaire Représentatif (VER) de la microstructure doit être défini. Un VER est un volume suffisamment grand pour que la variable étudiée, moyennée sur tout le volume, ne fluctue plus en augmentant la taille du dit volume. Dans notre cas, pour la modélisation du comportement mécanique par homogénéisation numérique, cela revient à déterminer le nombre de grains à partir duquel la courbe contrainte-déformation macroscopique est identique pour différentes réalisations statistiquement représentatives de la même microstructure. La taille du VER dépend de la microstructure considérée (phases en présence, texture), ainsi que des conditions aux limites utilisées. Ce sont les conditions aux limites périodiques qui permettent généralement l’utilisation du VER le plus petit [Kanit et al., 2003] : elles seront donc utilisées dans nos calculs.

L’utilisation de conditions aux limites périodiques représente le cas d’un élément de volume au cœur d’une éprouvette sollicitée par une déformation macroscopique  $\underline{\mathbf{E}}$  ou une contrainte macroscopique  $\underline{\Sigma}$ . Soit  $\underline{u}$  le champ de déplacement à déterminer. Pour un milieu périodique, on cherche  $\underline{u}$  tel que [Dirrenberger and Forest, 2010] :

$$\underline{u} = \underline{\mathbf{E}} \cdot \underline{x} + \underline{v} \quad \forall \underline{x} \in V \quad (4.7)$$

avec  $\underline{v}$  un champ de déplacement périodique qui prend les mêmes valeurs sur les bords opposés de  $V$ ,  $\delta V$ . Le vecteur des contraintes  $\underline{T}$ , défini comme  $\underline{T} = \underline{\sigma} \cdot \underline{n}$  avec  $n$  la normale extérieure à  $\delta V$  au point  $\underline{x}$ , prend lui des valeurs opposées sur les côtés opposés  $\delta V$ .

Afin d’utiliser ce type de conditions aux limites, les maillages éléments finis doivent être périodiques (i.e. sur les bords  $\delta V$  les nœuds des éléments doivent être symétriques). Les maillages sont réalisés avec *Neper*, qui fait appel au mailleur open-source *Gmsh* [Geuzaine and Remacle, 2009]. Des maillages réguliers composés d’éléments tétraédriques (C3D8) sont utilisés comme ailleurs dans la littérature [Zhang et al., 2007, Cruzado et al., 2017, Smith et al., 2018, Prithivirajan and Sangid, 2020]. L’influence de la qualité du maillage sur la réponse macroscopique contrainte-déformation est très limitée [Farooq et al., 2020]. De fait, pour identifier les paramètres du modèle de plasticité cristalline, des maillages contenant très peu d’éléments par grain sont utilisés. Le processus d’identification étant itératif, diminuer le nombre d’éléments le simplifie grandement. Les orientations cristallines uniformes qui sont attribuées aux grains dans les calculs sont générées avec *Neper* qui propose des outils adaptés [Quey et al., 2018].

### 4.1.3 Définition de la taille du VER

Une étude préliminaire permettant de déterminer la taille du VER à utiliser est réalisée. La définition du VER proposée dans [Przybyla and McDowell, 2010] est adaptée afin de tenir compte de l’absence de texture dans le matériau étudié. Un VER est obtenu si :

- la réponse effective macroscopique (contrainte-déformation) est identique pour différents arrangements locaux d’une même microstructure ;
- la réponse effective est isotrope, c’est-à-dire indépendante de l’axe de sollicitation arbitraire utilisé dans la simulation.

Pour vérifier ces conditions, la variabilité admissible entre les réponses macroscopiques effectives est fixée à 1 %, ce qui semble être un écart acceptable.

Le comportement des colonies lamellaires présentant une forte anisotropie plastique, on suppose que ce sont les microstructures totalement-lamellaires qui nécessitent le VER le plus grand. L’étude de convergence est donc réalisée sur une microstructure totalement-lamellaire fictive en utilisant le jeu de paramètres identifié sur monocolonie PST (voir chapitre 3, Tableau 3.7). À cet effet, une tessellation de Voronoï classique (i.e. pas statistiquement représentative [Quey and Renversade, 2018]) est utilisée.

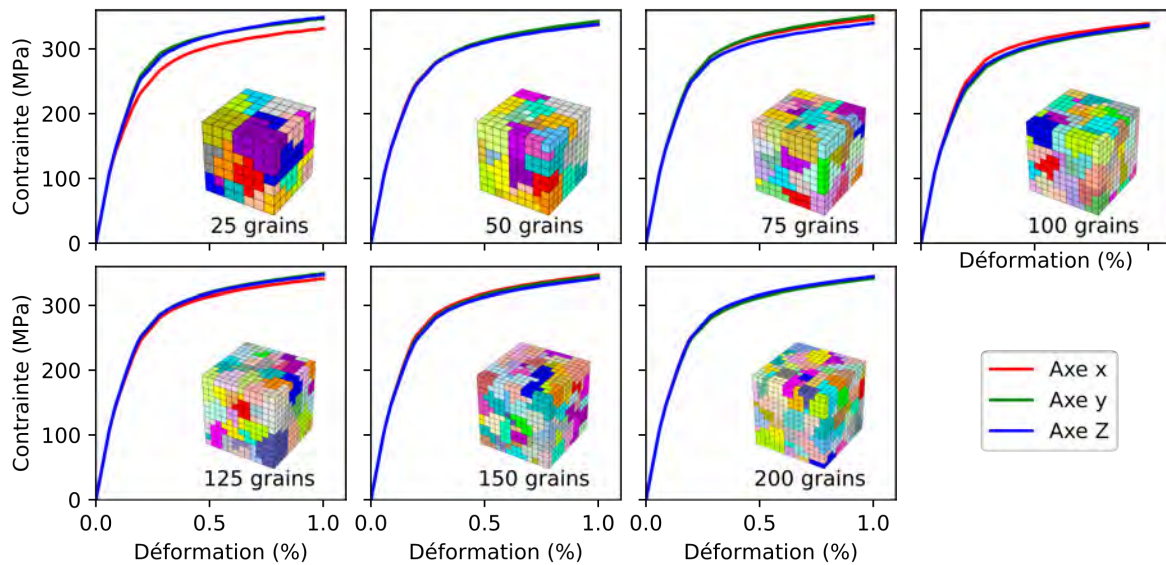


FIGURE 4.2 – Résultats des simulations d’essais de traction permettant de déterminer la taille du VER à utiliser. On présente pour les différents courbes contrainte-déformation les maillages correspondants. Sur ces maillages, les couleurs désignent les différents grains. Pour chaque figure, les différentes couleurs désignent les simulations sur les axes  $x$ ,  $y$  ou  $z$ , qui servent à vérifier la condition d’isotropie du VER. Si les couleurs ne sont pas distinguables, cela signifie que les résultats sont superposés et que la condition est vérifiée.

Sept microstructures avec un nombre de grains croissant sont générées. Chaque microstructure est sollicitée en traction jusqu’à une déformation macroscopique de 1 % suivant chaque axe arbitraire de déformation  $x$ ,  $y$  et  $z$ , soit trois calculs par microstructure.

Les résultats de ces essais de traction sont présentés en Figure 4.2. Pour chaque microstructure, les résultats des simulations sur les 3 axes de sollicitations sont présentés. On observe par exemple que la condition d’isotropie n’est pas vérifiée pour la microstructure contenant 25 grains, car le comportement obtenu est très différent lorsque la sollicitation est effectuée selon l’axe  $x$ . L’analyse des résultats montrent que les conditions énumérées précédemment sont vérifiées à partir de 150 grains. Ainsi, pour réaliser les homogénéisations numériques par la suite, des VER contenant 150 grains ou colonies seront utilisés.

## 4.2 Modélisation des essais micromécaniques

La simulation de l’essai micromécanique de traction réalisé au chapitre 2 sur une microstructure totalement-lamellaire permet de tester la démarche présentée en section 4 en confrontant les champs de déformation obtenus numériquement aux champs obtenus expérimentalement par corrélation d’images. Il s’agit de la première confrontation d’une modélisation du comportement des colonies lamellaires à des mesures de champs expérimentales de la déformation (chapitre 1).

Les paramètres du modèle de plasticité cristalline sont d’abord identifiés par calculs éléments finis et homogénéisation numérique. Les différentes étapes sont détaillées et serviront de référence pour la suite du manuscrit.

Un modèle éléments finis de l’éprouvette étudiée est ensuite créé. L’essai est modélisé et l’on compare les champs de déformation obtenus numériquement aux champs expérimentaux. On détermine ainsi si, en se basant sur une identification des paramètres du modèle à l’échelle

macroscopique, les champs locaux obtenus dans la microstructure sont représentatifs.

#### 4.2.1 Identification des paramètres par calcul éléments finis et homogénéisation numérique

Dans un premier temps, une microstructure statistiquement représentative de la microstructure totalement-lamellaire de l'alliage GE est générée. Les diamètres équivalents de plus de 300 colonies lamellaires sont mesurés manuellement à partir des micrographies MEB présentées au chapitre 2. La distribution expérimentale des diamètres équivalents est présentée en Figure 4.3a sous la forme d'une fonction de répartition. La loi log-normale correspondant à cette distribution expérimentale est calculée à partir de la moyenne et de l'écart type de la distribution (courbe noire).

A partir de cette loi log-normale, une microstructure statistiquement représentative est générée avec Neper en utilisant la commande :

```
$ neper -T -n 150 -dim 3 "diameq :lognormal(1,0.243),1-sphericity :lognormal(0.145,0.03)"
```

La microstructure générée est présentée en Figure 4.3b. Il s'agit d'une visualisation du résultat de la tessellation, la microstructure n'est, à ce stade, pas maillée par éléments finis. Une comparaison entre la distribution des diamètres équivalents expérimentaux et celle des diamètres équivalents issus de la microstructure numérique est présentée en Figure 4.3c. Les distributions expérimentales et simulées étant similaires, la microstructure numérique ainsi générée est bien une microstructure statistiquement représentative de la microstructure étudiée.

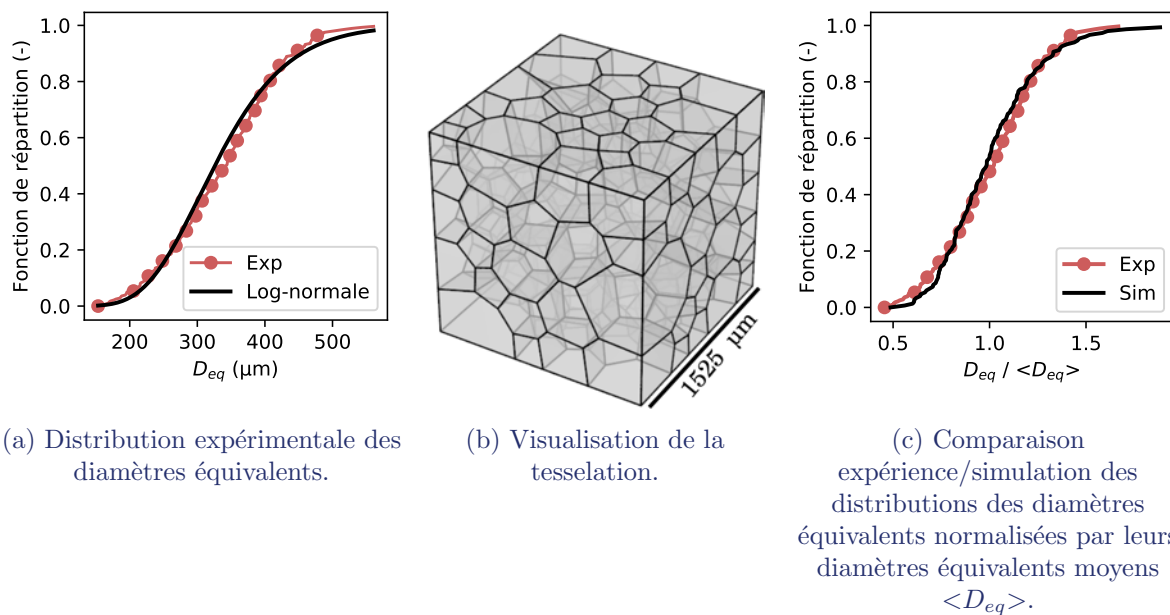


FIGURE 4.3 – Génération d'une microstructure statistiquement représentative de celle utilisée lors de la réalisation des essais micromécaniques. Les fonctions de répartition représentent les distributions des diamètres équivalents.

La microstructure est ensuite maillée par éléments finis directement avec Neper. Comme précisé en sous-section 4.1.2, un maillage grossier est utilisé pour l'identification. La microstructure est sollicitée en traction et l'homogénéisation numérique est effectuée. La courbe contrainte-déformation numérique est comparée à la courbe contrainte-déformation expérimentale pour réaliser l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline. L'identification est



Paramètre	$\phi_{el}^{lam}$ (-)	$\psi$ (-)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)
Rôle	Module d'Young macroscopique	Taille du domaine élastique	Écrouissage	
Valeur	1	0,89	43000	530

TABLEAU 4.1 – Paramètres du modèle de plasticité cristalline identifiés pour la microstructure totalement-lamellaire sur laquelle les essais micromécaniques ont été réalisés.

T (°C)	$\tau_{0,lam}^{lo}$	$\tau_{0,lam}^{mi}$	$\tau_{0,lam}^{tr}$	$\tau_{0,lam}^{pr}$	$\tau_{0,lam}^{py}$
20 °C	45,39	133,5	135,28	76	364

TABLEAU 4.2 – Cissions critiques de la microstructure totalement-lamellaire sur laquelle les essais micromécaniques ont été réalisés. Les valeurs sont en MPa. Les valeurs découlent des cissions critiques identifiés sur monocolonie (chapitre 3, Tableau 3.8) et de  $\psi$  (Équation 3.22).

manuelle et itérative : le calcul est réalisé à nouveau avec des paramètres actualisés jusqu'à ce que la courbe numérique corresponde à la courbe expérimentale.

Les paramètres à identifier et leurs rôles sur la modélisation sont indiqués dans le Tableau 4.1. On rappelle que grâce à la modélisation du comportement de monocolonies lamellaires au chapitre 3, un seul paramètre  $\psi$  doit être identifié au lieu de cinq cissions critiques. Les cissions critiques des colonies lamellaires  $\tau_{0,lam}$  découlent alors de  $\psi$  et des cissions identifiées sur monocolonies  $\tau_{0,PST}$  (Tableau 3.8 et Équation 3.22).

Expérimentalement, une dispersion importante du comportement mécanique macroscopique avait été observée pour la microstructure étudiée. Cette dispersion a été attribuée à la présence de colonies lamellaires géantes localement dans les éprouvettes. Sur la Figure 4.4, les différentes courbes contrainte-déformation expérimentales sont présentées. L'essai d'intérêt (points noirs) est celui pour lequel les mesures de champs sont disponibles. On observe que, malgré la dispersion, la courbe de l'essai d'intérêt est proche de celles d'autres essais (Essai 3, 5, voire 2). Ce groupe d'essais proches les uns des autres est considéré comme le comportement macroscopique moyen de la microstructure. On fait donc le choix pour l'identification de passer par ces essais. Enfin, on rappelle que la courbe de l'essai d'intérêt décroche à partir de 0,6 % de déformation du fait de la propagation d'une fissure longue.

Le résultat de l'identification est présenté en Figure 4.4 (trait bleu). Les paramètres identifiés sont indiqués dans le Tableau 4.1. Les cissions critiques qui découlent de  $\psi$  et du travail réalisé sur monocolonies sont données dans le Tableau 4.2.

La carte du champ de déformation local selon l'axe  $z$  (axe de sollicitation) à 0,6 % de déformation macroscopique est présentée sur la Figure 4.4. Bien que le maillage soit grossier, une hétérogénéité importante de la déformation est déjà observée car des colonies sont déformées localement à 1 % et d'autres à 0,2 %.

Afin de valider notre choix de modélisation vis-à-vis de la notion de VER, une simulation a été réalisée sur un deuxième arrangement statistiquement représentatif de la microstructure (trait rouge). On observe que la courbe contrainte-déformation obtenue est superposée à celle de la première simulation. Les champs locaux dans les deux arrangements sont par contre différents. Le VER est donc correctement défini.

Les paramètres matériaux identifiés, la modélisation de l'essai micromécanique va permettre de vérifier si les champs locaux obtenus numériquement sont représentatifs de ceux mesurés expérimentalement.

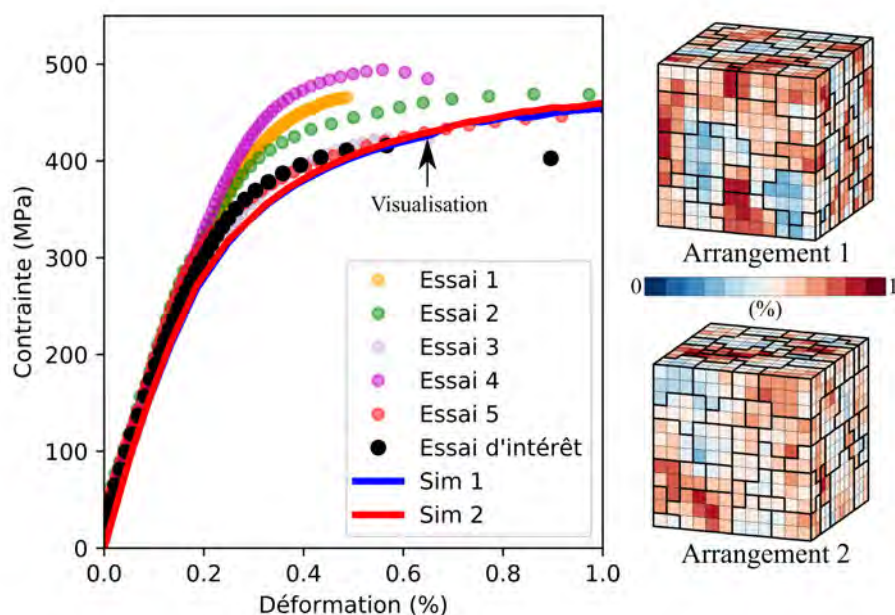


FIGURE 4.4 – Modélisation du comportement en traction de la microstructure lamellaire sur laquelle les essais micromécaniques ont été réalisés. L’essai d’intérêt pour lequel les mesures de champs sont disponibles correspond aux points noirs. La simulation 1 (trait bleu) réalisée avec l’arrangement 1 a été utilisée pour l’identification. La simulation 2 (trait rouge) réalisée ensuite avec l’arrangement 2 démontre que l’on a bien un VER car les courbes contraintes-déformation sont superposés mais les champs locaux sont différents.

#### 4.2.2 Modèle éléments finis de l’éprouvette : maillage & conditions aux limites

Afin de modéliser l’essai, un modèle éléments finis exact de l’éprouvette testée doit être construit. Une méthodologie permettant de réaliser un maillage conforme à partir des résultats expérimentaux est proposée. Les différentes étapes sont résumées sur la Figure 4.5.

Les contours des colonies sont délimités manuellement, tout comme l’orientation apparente du plan d’interface lamellaire (voir chapitre 2). L’image obtenue est ensuite traitée à l’aide de scripts Python utilisant la librairie de traitement d’images OpenCV. Chaque contour est détecté puis associé à un numéro de grain et à une orientation apparente du plan d’interface. On obtient alors une carte où chaque pixel est associé à un grain. À partir de cette carte, un fichier de tessellation au format de Neper est écrit. Le module de maillage de Neper est ensuite utilisé afin de réaliser un maillage 2D conforme avec une taille d’élément uniforme.

La démarche proposée est générique et peut être appliquée à n’importe quelle image. Il est par exemple possible de modéliser directement des résultats issus de la littérature comme des cartographies EBSD en extrayant les angles d’Euler associés.

Le maillage obtenu est 2D, mais le calcul doit être réalisé en 3D afin de simuler le cas d’une surface libre. Or, on ne dispose pas d’information sur la microstructure située sous la surface de l’éprouvette. Des études numériques ont montré que cette microstructure sous-jacente peut modifier les champs calculés en surface [Héripré, 2006, Zeghadi et al., 2007]. Néanmoins, [Martin, 2012] a montré que les différences sont plus d’ordre quantitatif que qualitatif. Cette étude étant une première comparaison du modèle de comportement des grains lamellaires à des résultats expérimentaux, ce biais est considéré acceptable. Le problème est donc contourné en s’inspirant de différentes solutions proposées dans différentes études de la littérature dans lesquelles les auteurs ont fait face au même problème [Bieler et al., 2009, Martin, 2012, Zhang et al., 2018].

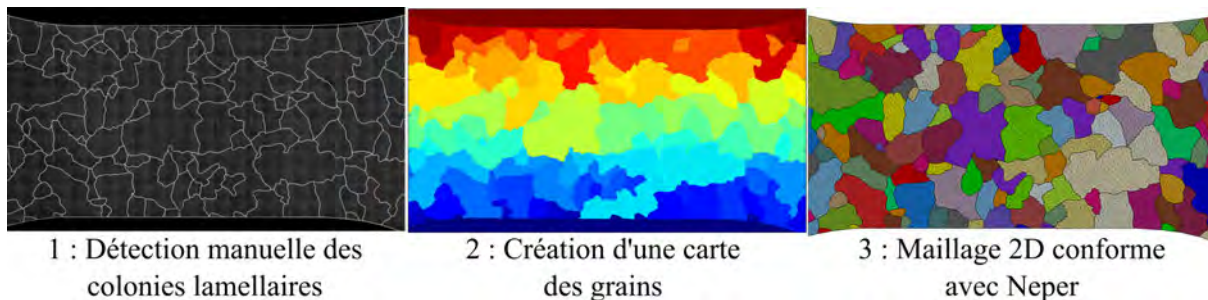


FIGURE 4.5 – Création d'un maillage éléments finis conforme à partir d'une image. Les couleurs désignent les différentes colonies lamellaires.

Le maillage est ainsi extrudé sur une épaisseur correspondant au diamètre équivalent moyen des colonies  $\langle D_{eq} \rangle$ , avec 5 éléments (C3D6) dans l'épaisseur. Sur la face extrudée, des conditions de symétrie sont imposées. Ainsi, on suppose que les colonies sont grandes dans l'épaisseur, ce qui est en accord avec les observations expérimentales. Enfin, plusieurs configurations (plusieurs grains dans l'épaisseur et/ou surface libre) ont été testées pour s'assurer de la pertinence des résultats. Si les valeurs locales peuvent être modifiées, les tendances globales (grains déformés, zones de localisation) ne sont pas modifiées, ce qui rejoint les observations de [Martin, 2012]. Cela confirme que la discussion réalisée par la suite n'est pas dépendante du modèle éléments finis de l'éprouvette.

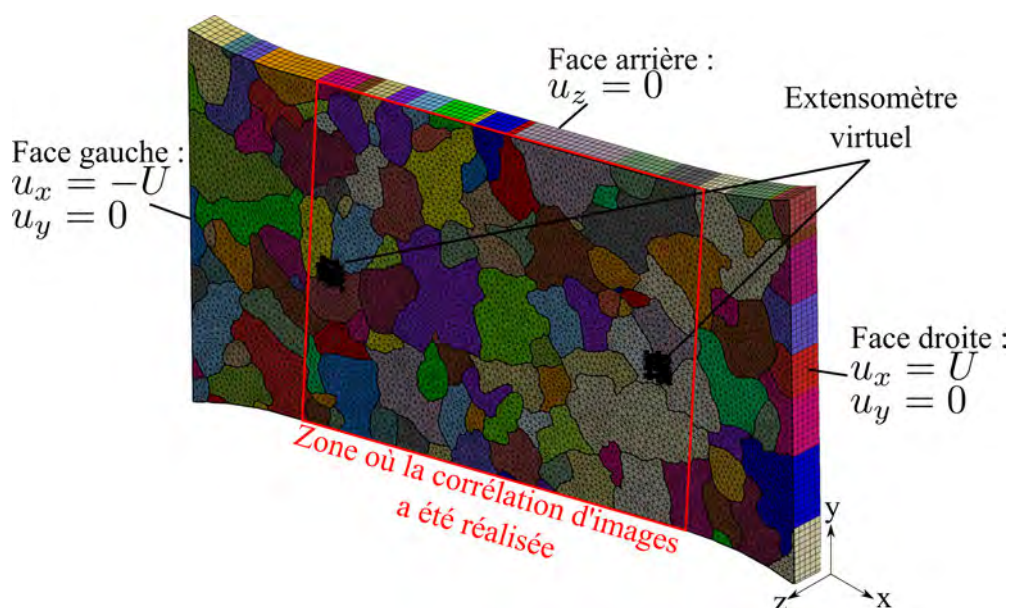


FIGURE 4.6 – Modèle éléments finis de l'éprouvette micromécanique avec les conditions limites associées.  $U$  est le déplacement imposé. Le maillage est composé de 89055 éléments prismatiques linéaires à base triangulaire (C3D6), 163530 degrés de liberté.

En ce qui concerne le maillage, un compromis a été trouvé entre la taille des mailles et le temps de calcul. En effet, avec la transition d'échelle utilisée pour évaluer la plasticité à l'échelle des lamelles, le temps de calcul croît exponentiellement avec le nombre d'éléments. Une étude de convergence a donc été réalisée afin de s'assurer que les résultats sont qualitativement (grains déformés, zones de localisation) indépendants du maillage. Le modèle final utilisé est présenté en Figure 4.6.

Une orientation cristalline doit ensuite être assignée aux colonies comme donnée d’entrée du modèle de plasticité cristalline. Or, seules les mesures de l’orientation apparente du plan d’interface lamellaire sont disponibles (i.e. pas de cartographie EBSD). Dans la littérature, des auteurs rapportent que la véritable orientation du plan d’interface lamellaire est souvent proche de l’orientation apparente de celui-ci [Héripré, 2006, Cornec et al., 2015, Edwards, 2018b]. De fait, l’angle apparent du plan d’interface lamellaire est utilisé pour définir l’orientation cristalline des colonies dans le modèle éléments finis et le modèle de plasticité. Un schéma permettant de visualiser cette approximation est présenté en Figure 4.7.

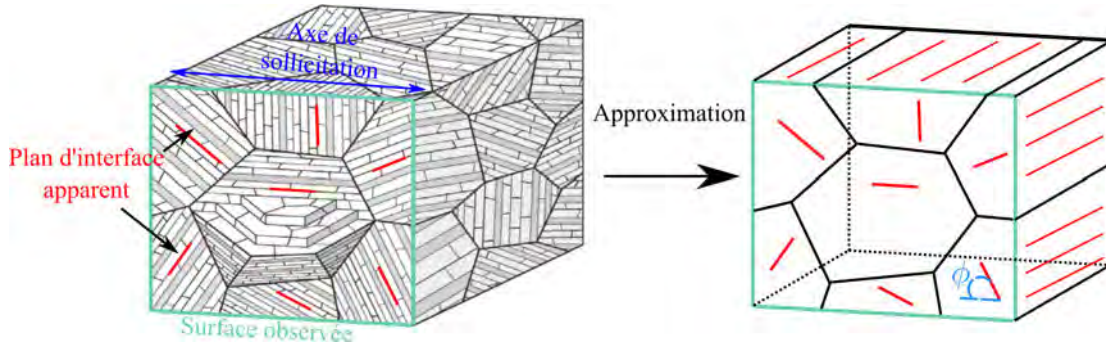


FIGURE 4.7 – Hypothèse sur l’orientation des colonies. Dans le modèle, les colonies sont orientées uniquement vis-à-vis d’un angle  $\phi$  par rapport à l’axe de chargement.

Les conditions aux limites utilisées sont présentées en Figure 4.6. Un déplacement  $U$  est imposé de chaque côté de l’éprouvette. La zone modélisée est plus grande que la zone étudiée expérimentalement. Cela permet de se rapprocher de conditions aux limites réalistes dans la zone d’intérêt comme cela a été montré dans [Heripre et al., 2007, Zhang et al., 2018], et ce sans avoir à imposer les déplacements mesurés par corrélation d’images en bord d’éprouvette.

Pour comparer la simulation à l’expérience, la réponse contrainte-déformation du modèle est d’abord comparée à celle mesurée expérimentalement. Pour cela, un extensomètre virtuel est utilisé, l’idée étant de quantifier la déformation dans la simulation comme cela a été réalisé lors du traitement de l’essai. Deux groupes de nœuds sont ainsi définis (Figure 4.6), les déplacements  $y$  sont moyennés, et la déformation  $(l - l_0)/l_0$  est calculée. Pour calculer la contrainte, les efforts de réaction sont récupérés sur les faces droite et gauche de l’éprouvette, puis, comme pour l’essai expérimental, on calcule  $\sigma = F/S$ , avec  $S$  la section au centre du modèle.

Enfin, afin de réaliser la comparaison simulation/expérience de la localisation de la déformation en surface, la grandeur scalaire  $\varepsilon_{xy(max)}$  proposée par [Di Gioacchino and Da Fonseca, 2013] est utilisée comme au chapitre 2 :

$$\varepsilon_{xy(max)} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}}{2}\right)^2 + \varepsilon_{xy}^2} \quad (4.8)$$

Seules les déformations dans le plan sont utilisées pour se rapprocher du cas expérimental.

### 4.2.3 Résultats & discussion

La réponse contrainte-déformation du modèle est comparée à la réponse expérimentale en Figure 4.8. Avant  $\varepsilon = 0,6\%$ , le modèle reproduit correctement le comportement observé expérimentalement. Ce niveau de déformation correspond en effet à l’instant où la propagation d’une fissure entraînant une chute de la contrainte commence à être observé expérimentalement, ce qui n’est pas modélisé ici.

On fait remarquer que l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline aurait pu être réalisée ici directement avec le modèle de l'éprouvette. Néanmoins, le processus d'identification étant itératif et le temps de calcul relativement long ( $\approx 1$  jour), nous avons préféré utiliser la notion de VER et de comportement macroscopique moyen qui rejoint les travaux de la troisième section de ce chapitre.

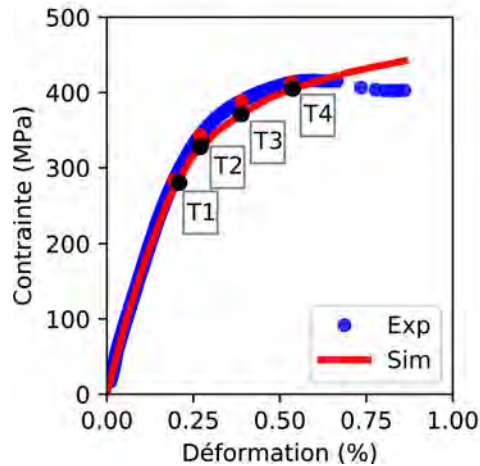


FIGURE 4.8 – Comparaison expérience/simulation de la réponse contrainte-déformation de l'éprouvette micromécanique. Les points et numéros correspondent aux instants où les champs locaux sont comparés en Figure 4.9.

Les points et numéros indiqués sur la figure Figure 4.8 correspondent aux instants où les champs de déformation numériques et expérimentaux sont comparés en Figure 4.9.

Au début de l'essai (T1), la déformation est globalement homogène, et le modèle retrouve les différentes zones de localisation observées expérimentalement (indiquées par des flèches bleues). Lorsque le chargement augmente (T2), les zones où la déformation s'accroît sont prédites par le modèle, excepté à l'endroit indiqué par une flèche orange. L'instant T3 correspond au moment où, expérimentalement, une fissure en surface est observée (flèche verte). La fissure apparaît à côté de la zone où le modèle est mis à défaut. Cette fissure n'étant pas prise en compte dans la modélisation, le champ mécanique autour de cette zone n'est pas correctement reproduit. Néanmoins, sur le reste de l'éprouvette, les zones de localisation observées expérimentalement sont globalement prédites par le modèle. Enfin, lorsque le chargement augmente encore (T4), la déformation s'accroît dans les zones déformées comme observé expérimentalement. La comparaison simulation/expérience devient plus difficile à cause de l'apparition de fissures qui modifient les champs de déformation. Néanmoins, dans les zones indiquées par des traits verts, les prévisions de la simulation sont proches des observations expérimentales.

En conclusion, le modèle de plasticité prédit les champs locaux de déformation aux différents instants du chargement. On retrouve la caractéristique principale de la déformation des microstructures lamellaires : l'activation séquentielle, progressive, de la plasticité.

Grâce au calcul, il est possible d'accéder à des grandeurs qui n'ont pas été mesurées expérimentalement. On propose de visualiser une carte de la contrainte équivalente de Von Mises  $\sigma_{eq}$  ainsi qu'une carte de la déformation hors-plan  $\varepsilon_{zz}$ .  $\sigma_{eq}$  est définie par :

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathfrak{s} : \mathfrak{s}} \quad (4.9)$$

avec  $\mathfrak{s}$  le déviateur du tenseur des contraintes. Ces cartes sont présentées sur la Figure 4.10 à l'instant T3.

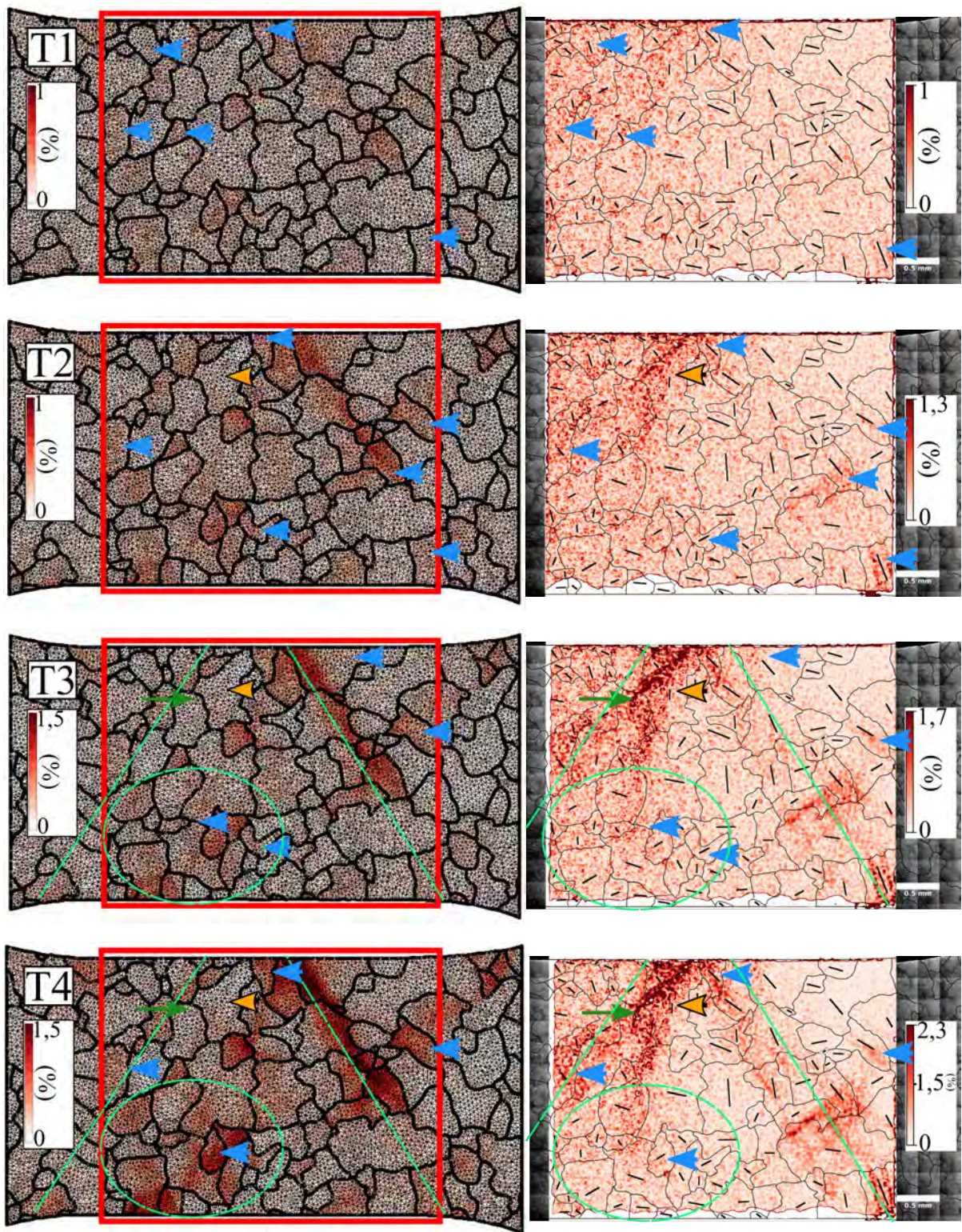


FIGURE 4.9 – Comparaison expérience/simulation des cartes des déformations  $\varepsilon_{xy(max)}$  aux instants de chargement indiqués Figure 4.8. Les flèches vertes indiquent des fissures observées en surface. Les flèches bleues indiquent des zones de déformation discutées dans le corps du texte. Les flèches oranges indiquent les endroits où le modèle est mis en défaut. Les traits et cercles verts indiquent les zones de localisation.

Le champ de contrainte est très hétérogène. Les zones où la contrainte est la plus élevée correspondent pour la plupart à des colonies orientées en mode dur ou mixte (flèches mauves et bleues). Néanmoins, des zones de concentration de contrainte apparaissent aussi lorsque deux colonies en mode mou sont désorientées de  $90^\circ$  (cercle jaune). Ces colonies se retrouvent en mode dur l'une par rapport à l'autre. Les zones où des fissures ont été observées expérimentalement (flèches vertes) sont associées à des niveaux de contrainte élevés.

On s'intéresse maintenant à la carte de la déformation hors-plan. Le niveau de déformation calculé est faible et toutes les colonies se déforment dans le même sens. Expérimentalement, des colonies se sont pourtant déformées significativement hors du plan. Il s'agit d'une limite de la modélisation actuelle : si visiblement l'utilisation du plan apparent des interfaces lamellaires permet d'obtenir des résultats cohérents en 2D, des mesures d'orientation cristalline sont nécessaires pour pouvoir prédire la déformation en 3D des colonies lamellaires.

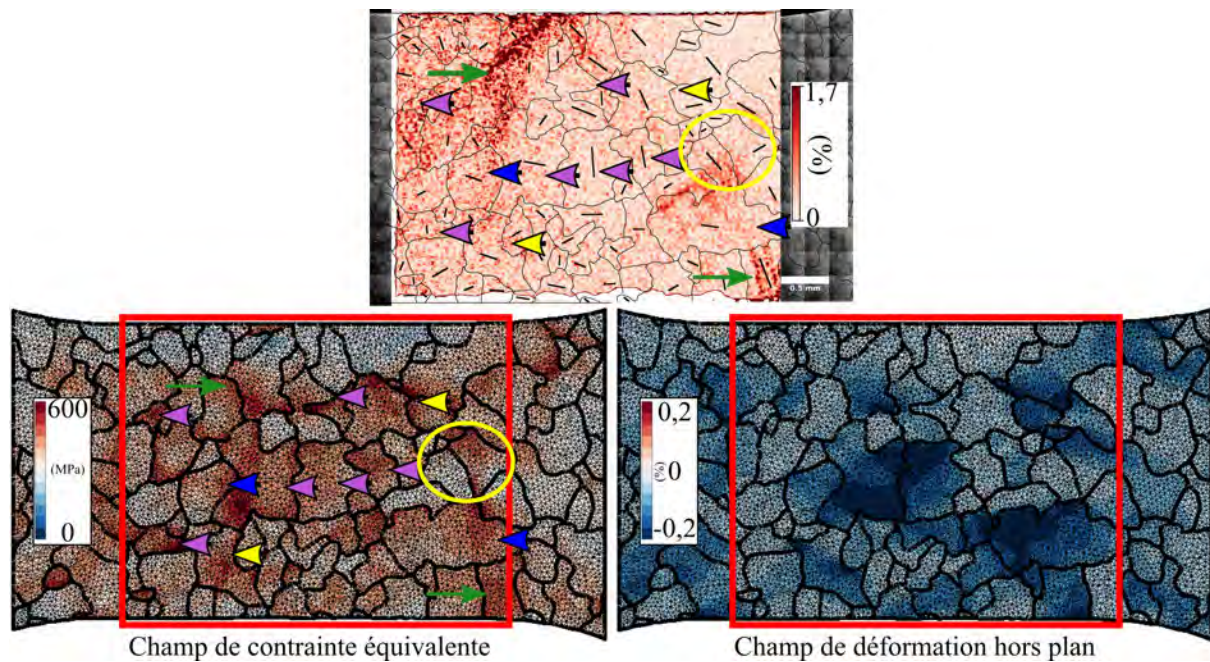


FIGURE 4.10 – Cartes du champ de contrainte équivalente  $\sigma_{mises}$  et du champ de déformation hors plan  $\varepsilon_{zz}$  à la surface de l'éprouvette à l'instant T3 indiqué en Figure 4.9. Les flèches vertes indiquent les zones où des fissures ont été observées expérimentalement. Les flèches mauves, jaunes et bleues indiquent respectivement des grains orientés en mode dur, en mode mou et en mode mixte.

Les résultats obtenus montrent qu'en identifiant les paramètres avec une vision macroscopique, les champs locaux obtenus dans la microstructure sont représentatifs des champs mesurés expérimentalement. Cela valide la démarche d'identification des paramètres présentées au début de ce chapitre, rendue ici possible grâce au travail préliminaire réalisé sur les monocolonies lamellaires (chapitre 3) sans lequel le nombre de paramètres à identifier aurait été trop important.

Cette comparaison expérience/simulation valide également l'approche retenue pour la modélisation du comportement des colonies lamellaires. L'anisotropie plastique des colonies lamellaires entraîne bien une activation séquentielle de la plasticité : les colonies en mode mou se déforment plastiquement alors que le comportement macroscopique est élastique, suivies des colonies en mode mixte puis en mode dur.

Pour la modélisation, il est intéressant de créer un modèle contenant au moins une centaine de colonies, et si possible plus grand que la zone où la corrélation d'images est réalisée afin que

celle-ci soit la plus éloignée possible des conditions aux limites du calcul. Cela a été possible ici grâce à la réalisation d’essais sous caméra, là où dans la littérature les champs observés *in situ* MEB contiennent rarement plus d’une dizaine de colonies.

L’amélioration des résultats de la modélisation passe nécessairement par un enrichissement des données expérimentales. Il est notamment essentiel pour de futurs travaux d’avoir accès à la véritable orientation cristalline des colonies lamellaires, et pas seulement au plan apparent d’interface lamellaire, pour modéliser leur comportement en 3D.

Il paraît difficilement envisageable de réaliser une cartographie EBSD sur une zone de plusieurs millimètres étant données les difficultés posées par la structure lamellaire à ce moyen de mesure (voir chapitre 1). Pour contourner ce problème, on propose de cartographier la microstructure manuellement à partir d’images MEB comme ici, puis d’effectuer quelques pointés EBSD dans chaque colonie pour mesurer sa véritable orientation cristalline. Dans un second temps, la déformation hors-plan en surface pourrait être mesurée avec un profilomètre. Ces mesures pourraient être réalisées avant l’essai, pendant l’essai (i.e. interruption d’un essai cyclique), puis après l’essai.

#### 4.2.4 Remarque concernant le comportement des grains $\gamma$

Dans la démarche globale, un essai micromécanique sur une microstructure presque- $\gamma$  devait aussi être modélisé pour valider la modélisation du comportement des grains  $\gamma$ . Malheureusement, l’essai réalisé n’a pas donné suffisamment d’informations pour être simulé (chapitre 2).

Néanmoins, plusieurs auteurs ont déjà comparé la simulation du comportement des grains  $\gamma$  à des résultats expérimentaux avec des modèles similaires au nôtre [Héripré, 2006, Bieler et al., 2009, Geoffroy, 2013]. Pour la suite du travail, on estime que les champs mécaniques locaux des grains  $\gamma$  prédits par le modèle sont représentatifs. De futurs travaux devront toutefois se pencher sur une comparaison avec des mesures de champs expérimentales.

### 4.3 Modélisation du comportement des quatre microstructures génériques

Dans cette section, le comportement mécanique à 20 °C et 750 °C des quatre microstructures génériques des alliages TiAl est modélisé par calcul éléments finis et homogénéisation numérique. La procédure générale utilisée pour générer les microstructures et identifier les paramètres du modèle de plasticité a été détaillée en sous-section 4.2.1. La discussion s’oriente ici sur les spécificités liées à l’étude de microstructures multiphasées, et à la définition d’une procédure d’identification basée sur les caractéristiques microstructurales.

La phase de génération des microstructures statistiquement représentatives est d’abord présentée, suivie de la méthode utilisée pour l’identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline. Les résultats obtenus sont ensuite analysés.

#### 4.3.1 Génération des microstructures statistiquement représentatives

Les quatre microstructures génériques d’intérêt sont celles dont le comportement cyclique a été étudié au chapitre 2. Il s’agit des microstructures presque- $\gamma$ , duplex, presque-lamellaire et totalement-lamellaire. Hormis cette dernière, ces microstructures sont multiphasées, ce qui ajoute un degré de complexité à leur reconstruction.  $\langle D_{eq} \rangle$  et  $\sigma_{D_{eq}}$  sont respectivement le diamètre équivalent moyen et la déviation standard du diamètre équivalent. Ces grandeurs sont les paramètres des lois log-normales et sont directement utilisées pour la génération des microstructures virtuelles. Pour s’assurer de la reproductibilité des résultats, les commandes utilisées



pour la génération des microstructures sur Neper sont précisées en annexe B.

### Microstructure presque- $\gamma$

La microstructure presque- $\gamma$  est complexe car tri-phasée : on observe des grains  $\gamma$  (95 %),  $\alpha_2$  (2,5 %) et  $\beta_0$  (2,5 %). Pour caractériser les distributions des tailles de grains, les données des cartographies EBSD réalisées au chapitre 2 ont été utilisées. Les caractéristiques microstructurales sont indiquées dans le tableau Tableau 4.3.

Phase	Fraction surfacique	$\langle D_{eq} \rangle$ ( $\mu\text{m}$ )	$\sigma_{D_{eq}}$ (-)
$\gamma$	95	5,54	4,44
$\alpha_2$	2.5	1,82	0,81
$\beta$	2.5	1,59	0,53
<i>Mixte</i>	100	3,92	3,90

TABLEAU 4.3 – Résultats de la caractérisation microstructurale de la microstructure presque- $\gamma$ . *Mixte* indique toutes les phases mélangées (à utiliser pour une reconstruction simplifiée).

Des tessellations en 2D sont d'abord réalisées afin d'ajuster au mieux les fractions surfaciques obtenues numériquement aux fractions surfaciques mesurées expérimentalement. Une fois ces paramètres fixés, une tessellation 3D est réalisée, et les distributions numériques de taille de grains sont comparées aux résultats expérimentaux.

Le résultat de la génération est présenté en Figure 4.11. Les caractéristiques principales de la microstructure sont retrouvées, avec des grains  $\gamma$  entourés de petits grains  $\alpha_2$  et  $\beta_0$ . La génération de cette microstructure en 3D est coûteuse en ressource de calcul du fait de sa complexité. Néanmoins, la dispersion de taille des grains  $\gamma$  est respectée.

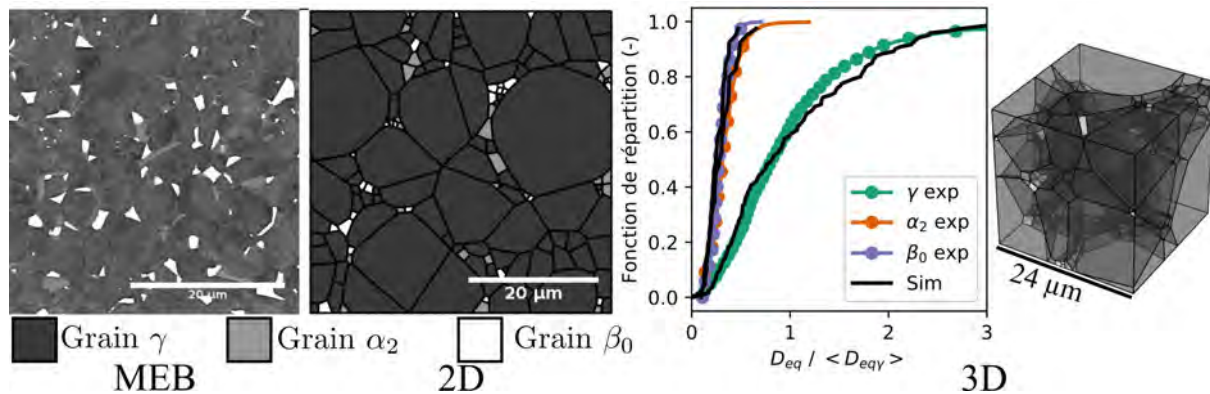


FIGURE 4.11 – Génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives de la microstructure presque- $\gamma$ . Une micrographie BSE prise au MEB est présentée comme élément de comparaison. Les contrastes des phases sur les microstructures virtuelles sont ajustés pour ressembler aux contrastes expérimentaux. Sur la microstructure virtuelle, on observe des grains  $\alpha_2$  et  $\beta_0$  situés aux interfaces des grains  $\gamma$ , ce qui correspond aux observations expérimentales.

Pour la fonction de distribution, les diamètres équivalents sont normalisés par le diamètre équivalent moyen des grains  $\gamma \langle D_{eq\gamma} \rangle$ .

### Microstructure duplex

La microstructure duplex est biphasée et contient dans des proportions équivalentes des grains  $\gamma$  et des colonies lamellaires dont les tailles sont proches. Les résultats de la caractérisation

expérimentale réalisée manuellement à partir d'images MEB sont donnés dans le Tableau 4.4. Les résultats de la génération sont présentés en Figure 4.12.

Phase	Fraction surfacique	$\langle D_{eq} \rangle$ ( $\mu\text{m}$ )	$\sigma_{D_{eq}}$ (-)
$\gamma$	0,35	7,14	1,80
Lamellaire	0,65	9,55	2,62

TABLEAU 4.4 – Résultats de la caractérisation des lois normales pour la microstructure duplex.

Les tailles des grains et colonies étant proches, cette microstructure est simple à générer. On retrouve bien les caractéristiques de la microstructure, avec des regroupements de grains ou de colonies.

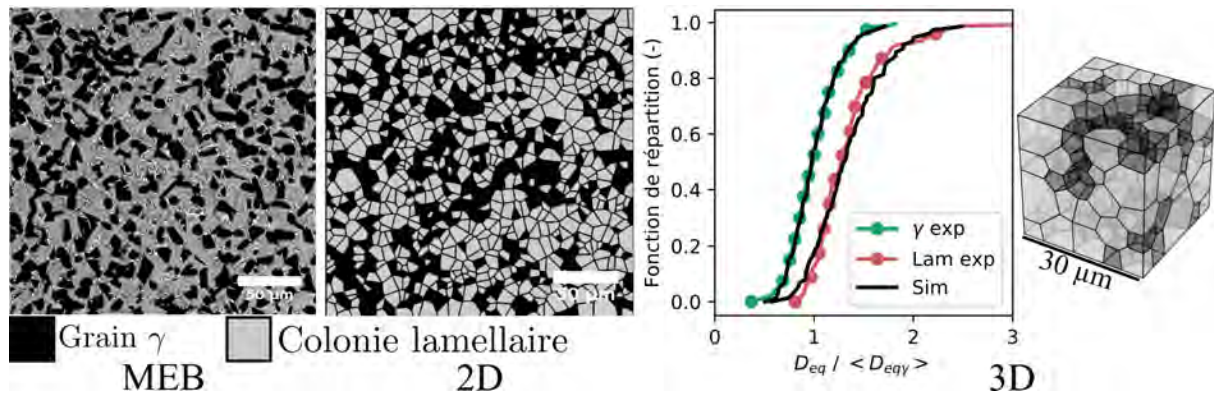


FIGURE 4.12 – Génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives de la microstructure duplex. Une micrographie BSE prise au MEB est présentée comme élément de comparaison. Les contrastes des phases sur les microstructures virtuelles sont ajustés pour ressembler aux contrastes expérimentaux. Pour la fonction de distribution, les diamètres équivalents sont normalisés par le diamètre équivalent moyen des grains  $\gamma \langle D_{eq\gamma} \rangle$ .

#### Microstructure presque-lamellaire

La microstructure presque-lamellaire est composée majoritairement de colonies lamellaires (90 %), mais contient une proportion non négligeable de grains  $\gamma$  (10 %). Les résultats de la caractérisation microstructurale sont donnés dans le Tableau 4.5. La différence d'un facteur 10 entre la taille de grains  $\gamma$  et des colonies lamellaires rend la génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives complexe. Pour appuyer ce point, un exemple obtenu en suivant la démarche utilisée jusqu'à présent est proposé en Figure 4.13.

On parvient à reproduire la microstructure en 2D, constituée de grandes colonies lamellaires et de petits grains  $\gamma$ . Néanmoins, la différence de taille entre les deux phases pose problème pour aller plus loin : il faudrait utiliser un maillage trop raffiné pour tenir compte des grains  $\gamma$ . Afin de contourner ce problème, on choisit de représenter les grains  $\gamma$  par clusters.

Un cluster est défini comme un groupe d'au moins 5 grains  $\gamma$  situés à l'interface entre plusieurs colonies lamellaires (cercle rouge en Figure 4.13). La distribution de taille des clusters de grains  $\gamma$  est mesurée, et l'on considère donc lors de la reconstruction non pas les grains  $\gamma$  individuellement mais les clusters. Les résultats de la caractérisation par grappe sont donnés dans le Tableau 4.5. Les résultats de la génération sont présentés en Figure 4.14.

#### Microstructure totalement-lamellaire

La microstructure totalement-lamellaire ne contient comme son nom l'indique que des colonies lamellaires. Elle est donc simple à générer. On rappelle que le matériau étudié ici n'est

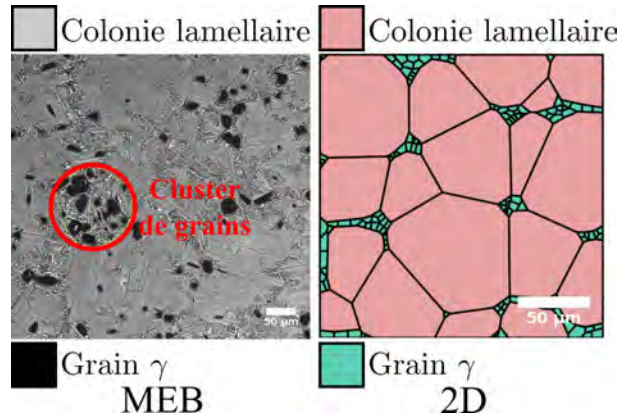


FIGURE 4.13 – Génération de la microstructure presque-lamellaire en suivant la démarche classique. Sur le modèle 2D, les grains  $\gamma$  sont très petits ce qui rend le passage en 3D et le processus de maillage délicats. Afin de contourner le problème, les grains  $\gamma$  sont représentés par des clusters (cercle rouge).

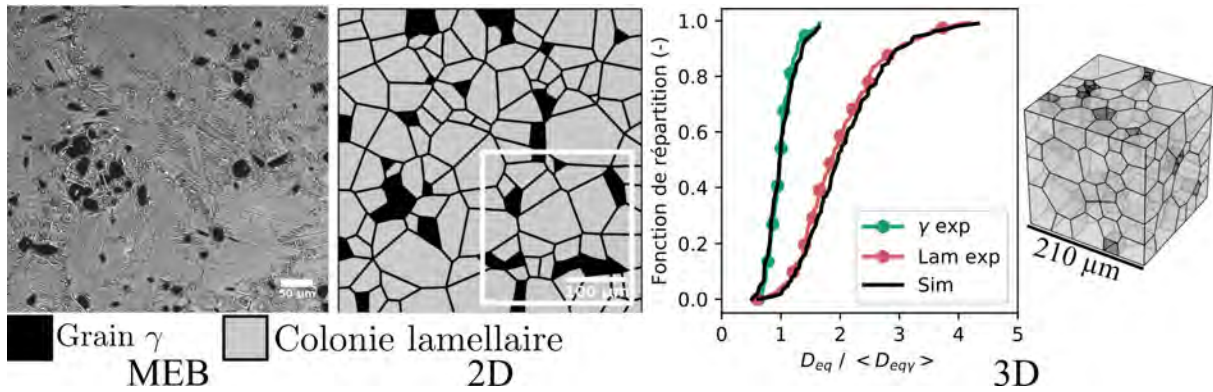


FIGURE 4.14 – Génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives de la microstructure presque-lamellaire. Une micrographie BSE prise au MEB est présentée comme élément de comparaison. Les contrastes des phases sur les microstructures virtuelles sont ajustés afin de ressembler aux contrastes expérimentaux. Pour la fonction de distribution, les diamètres équivalents sont normalisés par le diamètre équivalent moyen des grains  $\gamma$   $\langle D_{eq\gamma} \rangle$ .

La zone encadrée par le carré blanc correspond approximativement à la taille du champ observé au MEB.

Phase	Fraction surfacique	$\langle D_{eq} \rangle$ ( $\mu\text{m}$ )	$\sigma_{D_{eq}}$ (-)
$\gamma$	0,1	6,27	1,83
Cluster $\gamma$	0,1	30	7,8
Lamellaire	0,9	60,7	21,46

TABLEAU 4.5 – Résultat de la caractérisation des lois normales pour la microstructure presque-lamellaire. La ligne "Cluster  $\gamma$ " correspond à la mesure de la taille des grains  $\gamma$  par cluster (voir Figure 4.13).

pas le même que dans la section 4.2. Le type de microstructure est par contre similaire. Les résultats de la caractérisation sont donnés dans le Tableau 4.6. Les résultats sont présentés en Figure 4.15.

Phase	Fraction surfacique	( $\mu\text{m}$ )	$\sigma_{D_{eq}}$ (-)
<i>Lamellaire</i>	1	201	73

TABLEAU 4.6 – Résultat de la caractérisation des lois normales pour la microstructure lamellaire.

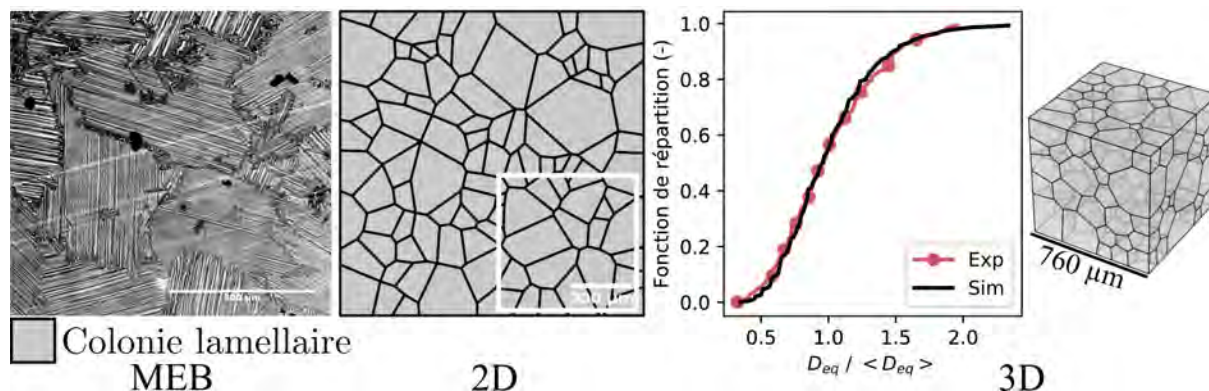


FIGURE 4.15 – Génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives de la microstructure totalement lamellaire. Une micrographie BSE prise au MEB est présentée comme élément de comparaison. Pour la fonction de distribution, les diamètres équivalents sont normalisés par le diamètre équivalent moyen  $\langle D_{eq} \rangle$ . La zone encadrée par le carré blanc correspond approximativement à la taille du champ observé au MEB.

### 4.3.2 Modélisation du comportement cyclique : identification des paramètres

L'objectif de cette sous-section est d'identifier les paramètres matériaux du modèle de plasticité cristalline afin de modéliser les comportements cycliques élasto-visco-plastiques à 20 °C et 750 °C des microstructures génériques des alliages TiAl par calcul éléments finis et homogénéisation numérique. La mise en donnée des calculs (maillage, conditions limites, VER) est précisée en section 4.1.

Dans une première sous-section, la démarche d'identification est détaillée. Les résultats obtenus sont ensuite présentés puis discutés.

#### 4.3.2.1 Démarche proposée pour l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline

La procédure d'identification des paramètres doit être basée sur les caractéristiques microstructurales. En effet, le modèle de plasticité cristalline utilisé ne tient pas compte à ce stade des effets de taille de grains. Ce sont donc les paramètres matériaux qui doivent refléter l'évolution des caractéristiques microstructurales. Par exemple, l'étude bibliographique a montré que les alliages TiAl suivent une loi de Hall-Petch reliant la taille des grains ou des colonies à la limite d'élasticité. Les cissons critiques du modèle doivent donc diminuer si la taille des grains ou des colonies augmente et inversement.

Le processus d'identification s'effectue dans l'ordre suivant :

- les paramètres des grains  $\gamma$  sont identifiés à partir des essais réalisés sur la microstructure presque- $\gamma$ . Leur taille étant identique dans les autres microstructures, ces paramètres sont fixés. On rappelle que ce sont les grains  $\gamma$  qui pilotent la sensibilité aux effets visqueux ;
- les paramètres des grains  $\alpha_2$  et  $\beta_0$  sont aussi identifiés à partir des essais réalisés sur la microstructure presque- $\gamma$  ;

- les essais réalisés sur la microstructure totalement-lamellaire sont utilisés afin d’identifier un premier jeu de paramètres pour les colonies lamellaires ;
- le jeu de paramètres précédemment identifié est ajusté afin de modéliser le comportement mécanique de la microstructure presque-lamellaire, car la taille des colonies et l’épaisseur des lamelles  $y$  sont fortement réduites par rapport à celles de la microstructure totalement lamellaire ;
- pour la microstructure duplex, on émet l’hypothèse que la taille des colonies et l’épaisseur des lamelles sont suffisamment proches de celles de la microstructure presque-lamellaire : aucun paramètre n’est identifié. L’aspect prédictif de la simulation et de la démarche est ainsi testé.

On rappelle que le modèle ne prend pas en compte le fort adoucissement transitoire observé expérimentalement sur les microstructures duplex et presque- $\gamma$  (chapitre 2). L’identification est donc optimisée pour la description des boucles d’hystérésis car l’objectif de la phase finale de notre travail est l’étude de la tenue en fatigue.

Enfin, les différents paramètres matériaux identifiés ici ou issus du chapitre 3 sont précisés au fil de la description des résultats, avec leurs rôles respectifs sur la modélisation.

#### 4.3.2.2 Résultats

##### Microstructure presque- $\gamma$

Les paramètres identifiés pour les grains  $\gamma$  sont présentés dans le Tableau 4.7 et ceux pour les grains  $\alpha_2$  et  $\beta_0$  dans le Tableau 4.8. Les rôles des différents paramètres  $y$  sont précisés. On rappelle que les cissions critiques de la phase  $\alpha_2$  ont été fixées au chapitre 3 (sous-section 3.2.2) à partir de résultats de la littérature. Le même écrouissage cinématique ( $c$ ,  $d$ ) et la même correction du tenseur d’élasticité  $\phi_{el}$  sont appliqués à la phase  $\gamma$  et à la phase  $\alpha_2$ . La phase  $\beta_0$  a un comportement élastique isotrope, avec un module d’Young égal au module d’Young macroscopique (différent à 20 °C et 750 °C).

Grains $\gamma$						
Paramètre	$\phi_{el}^\gamma$ (-)	$\tau_0^\gamma$ (MPa)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)	$n$ (-)	$K$ (MPa)
Rôle	Élasticité	Taille du domaine élastique	Écrouissage		Effets de vitesse	
À 20 °C	0,95	130	110000	0	20	1
À 750 °C	0,82	55	19000	280	5	250

TABLEAU 4.7 – Paramètres identifiés pour les grains  $\gamma$  monolithiques à 20 °C et 750 °C.

Les résultats de la modélisation du comportement de la microstructure presque- $\gamma$  sont présentés en Figure 4.16.

A 20 °C (triangles), la forme de la boucle d’hystérésis est correcte (courbe en haut à droite). Par contre, en traction (courbe en haut à gauche), on ne parvient pas à rattraper le plateau après la bosse. C’est une limite de la modélisation actuelle due au fait que l’adoucissement transitoire n’est pas représenté : les comportements en traction et cyclique ne sont pas reproduits simultanément.

À 750 °C (ronds), on parvient à modéliser le comportement en traction et cyclique en rattrapant la pente de l’écrouissage en traction après l’entrée dans le domaine plastique. Les effets

Grains $\alpha_2$ et $\beta_0$							
Paramètre	$\phi_{el}^{\alpha_2}$ (-)	$\tau_0^{pr}$ (MPa)	$\tau_0^{ba}$ (MPa)	$\tau_0^{py}$ (MPa)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)	$E_{\beta_0}$ (GPa)
Rôle	Élasticité	Taille du domaine élastique			Écrouissage		Élasticité
À 20 °C	0,95	100	330	910	110000	0	175
À 750 °C	0,82	35	200	545	19000	280	153

TABLEAU 4.8 – Paramètres identifiés pour les grains  $\alpha_2$  et  $\beta_0$  monolithiques à 20 °C et 750 °C (rouge = paramètres identifiés, vert = paramètres fixés (sous-section 3.2.2)).

de vitesse sont correctement capturés : la contrainte diminue avec la diminution de la vitesse de déformation.

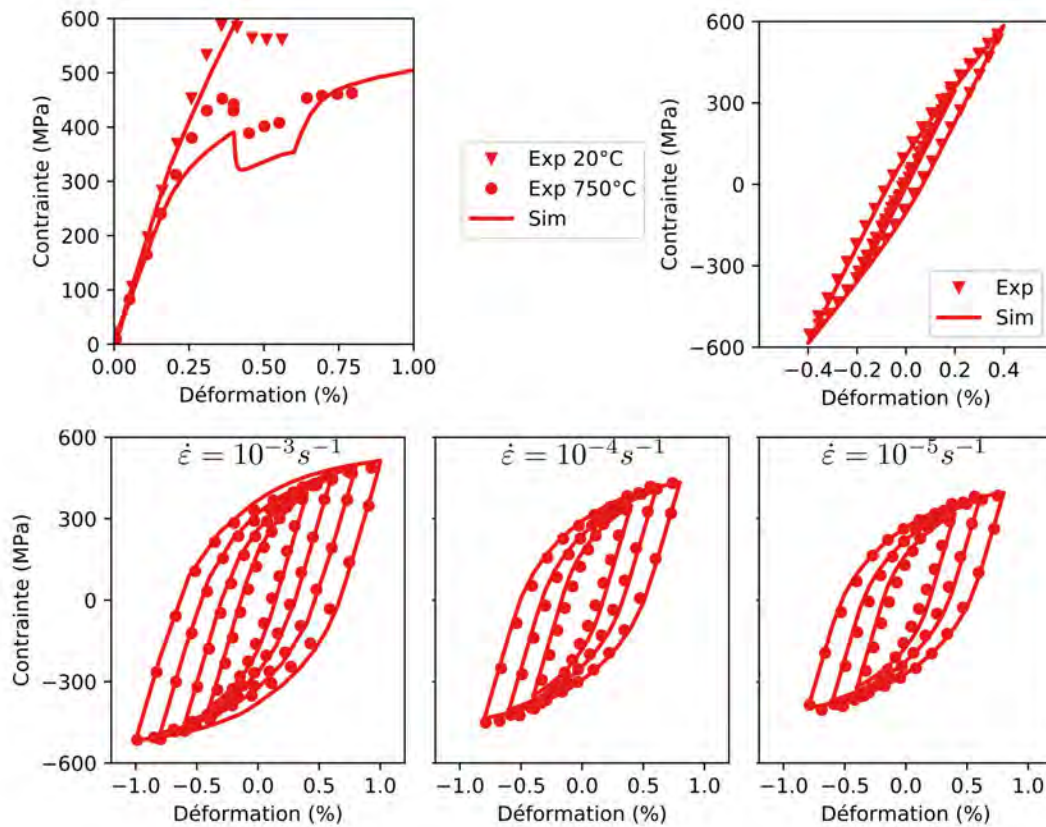


FIGURE 4.16 – Résultats de l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline pour la modélisation du comportement de la microstructure presque- $\gamma$ .

### Microstructure totalement-lamellaire

Les paramètres matériaux des colonies lamellaires de la microstructure totalement-lamellaire sont donnés dans le Tableau 4.10. On rappelle que les colonies lamellaires sont considérées comme insensibles aux effets de vitesses dans la gamme de vitesse considérée. Grâce au travail réalisé sur monocolonies (chapitre 3), un seul paramètre  $\psi$  doit être identifié au lieu de cinq cissons critiques (voir Équation 3.22). Les cissons critiques obtenues sont indiquées dans le Tableau 4.9.

Le comportement modélisé est présenté en Figure 4.17. L'approche définie au chapitre 3

T (°C)	$\tau_{0,lam}^{lo}$	$\tau_{0,lam}^{mi}$	$\tau_{0,lam}^{tr}$	$\tau_{0,lam}^{pr}$	$\tau_{0,lam}^{py}$
20 °C	25	73,5	80,9	49	446
750 °C	12,75	37,5	26,6	25	159,25

TABLEAU 4.9 – Cissions critiques de la microstructure totalement-lamellaire. Les valeurs découlent des cissions critiques identifiés sur monocolonies et de  $\psi$  (voir Équation 3.22).

permet de reproduire la forme des boucles d'hystérésis. Une cohérence est cette fois conservée entre le comportement en traction et le comportement cyclique. Les cissions critiques diminuent de moitié entre 20 °C et 750 °C.

Paramètre	$\phi_{el}^{lam}$ (-)	$\psi$ (-)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)
Rôle	Module d'Young macroscopique	Taille du domaine élastique	Écrouissage	
À 20 °C	1	0,49	56000	480
À 750 °C	0,9	0,25	60000	430

TABLEAU 4.10 – Identification des paramètres de la loi de plasticité cristalline pour la microstructure totalement-lamellaire.

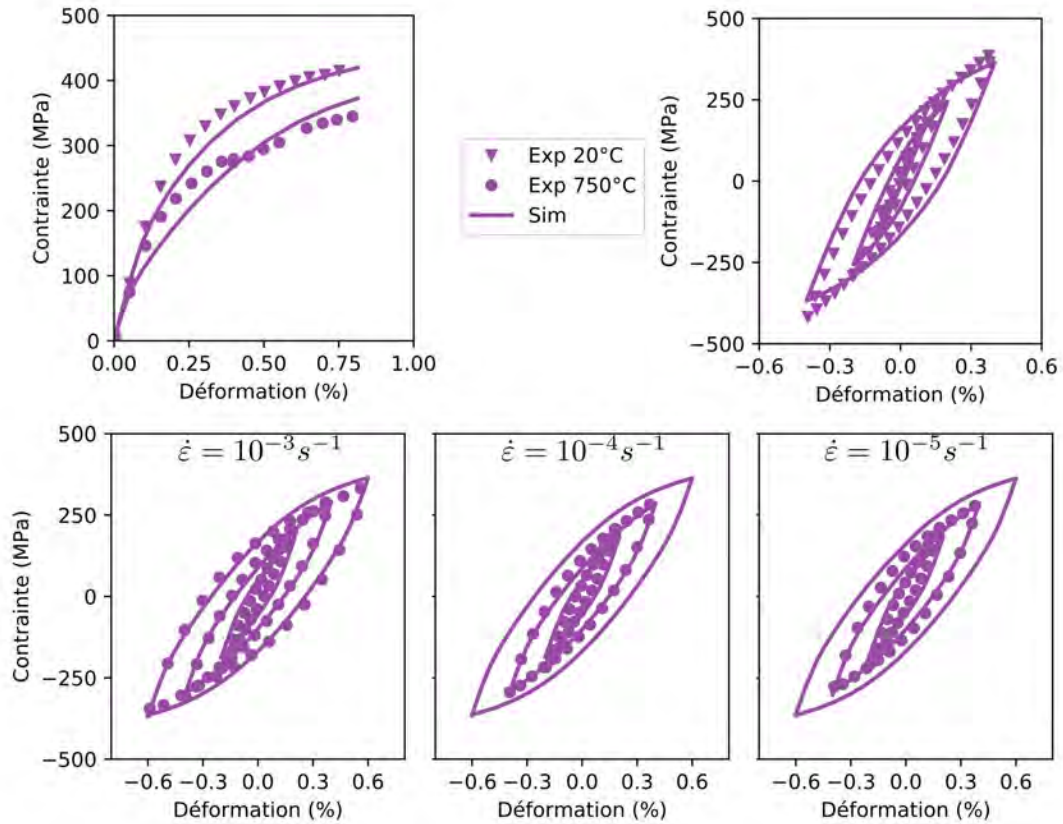


FIGURE 4.17 – Résultats de l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline pour la modélisation du comportement de la microstructure totalement-lamellaire. Pour certaines vitesses, le cycle stabilisé expérimental à  $\Delta\varepsilon/2=0,6$  % n'est pas disponible.

Les cissions critiques identifiées ici à 20 °C sont inférieures à celles identifiées à partir de l'essai de traction micromécanique (réalisé sur un autre alliage) en sous-section 4.2.1, alors que les niveaux de contrainte observés sont globalement similaires. En effet, le compromis en terme d'identification conduit ici à donner beaucoup de poids à la description du comportement cyclique, et donc à la définition de cissions critiques pertinentes au regard des boucles d'hystérésis. Cela s'effectue au détriment de la description de l'entrée dans le domaine plastique en traction.

T (°C)	$\tau_{0,lam}^{lo}$	$\tau_{0,lam}^{mi}$	$\tau_{0,lam}^{tr}$	$\tau_{0,lam}^{pr}$	$\tau_{0,lam}^{py}$
20 °C	31	90	91,2	60	546
750 °C	17,8	52,5	37,2	35	223

TABLEAU 4.11 – Cissions critiques de la microstructure presque-lamellaire. Les valeurs découlent des cissions critiques identifiées sur monocolonie (chapitre 3, Tableau 3.8) et de  $\psi$  (Équation 3.22).

### Microstructure presque-lamellaire

Les paramètres identifiés pour modéliser le comportement des colonies lamellaires dans la microstructure presque-lamellaire sont donnés dans le Tableau 4.12 et le Tableau 4.11. Les paramètres utilisés pour les grains  $\gamma$  sont ceux déjà identifiés à partir des résultats de la microstructure presque- $\gamma$ . Ces grains  $\gamma$  sont sensibles aux effets visqueux.

Le comportement obtenu est présenté en Figure 4.18. Avec la stratégie adoptée, les comportements en traction et sous sollicitations cycliques sont modélisés avec succès pour les deux températures étudiées. Les valeurs des cissions critiques et de l'écroissage sont légèrement supérieures à celles de la microstructure totalement-lamellaire. Ce résultat est logique car les colonies lamellaires et leurs espacements lamellaires sont ici plus petits. Une relation de type Hall-Petch est donc bien retrouvée. De façon intéressante, les cissions critiques identifiées diminuent de moitié lors du passage de 20 °C à 750 °C, comme pour la microstructure totalement-lamellaire. Enfin, on note que les grains  $\gamma$  (10 % de fraction volumique) n'ajoutent pas une sensibilité à la vitesse de déformation significative.

Paramètre	$\phi_{el}^{lam}$ (-)	$\psi$ (-)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)
Rôle	Module d'Young macroscopique	Taille du domaine élastique	Écroissage	
À 20 °C	1	0,6	75000	480
À 750 °C	0,9	0,3	68000	430

TABLEAU 4.12 – Identification des paramètres de la loi de plasticité cristalline pour la microstructure presque-lamellaire.



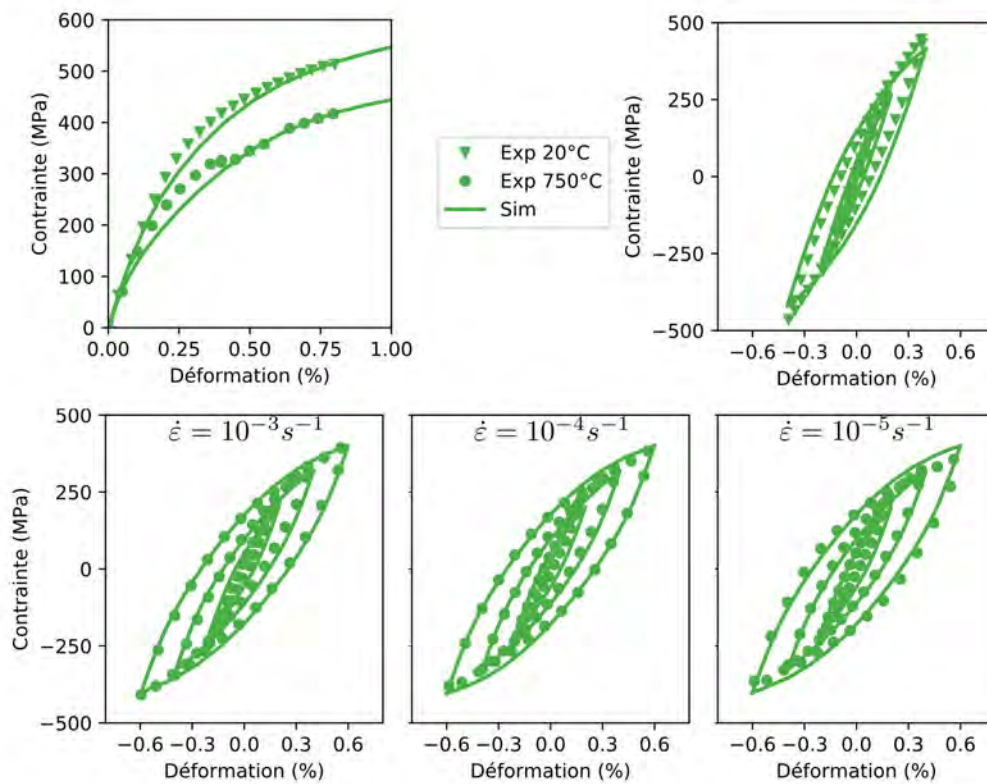


FIGURE 4.18 – Résultats de l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline pour la modélisation du comportement de la microstructure presque-lamellaire.

### Microstructure duplex

Pour la modélisation du comportement de la microstructure duplex, aucune identification n'est réalisée. Les paramètres des colonies lamellaires sont ceux identifiés à partir du comportement de la microstructure presque-lamellaire (Tableau 4.12). Les paramètres des grains  $\gamma$  sont ceux identifiés à partir du comportement de la microstructure presque- $\gamma$  (Tableau 4.7). On rappelle que ces paramètres ne permettent pas de décrire le comportement en traction de la microstructure presque- $\gamma$  à 20 °C.

De façon remarquable, on prédit avec succès le comportement mécanique de la microstructure duplex, excepté pour la traction à 20 °C comme l'on pouvait s'y attendre. Les formes des boucles d'hystérésis sont correctement reproduites. La présence de grains  $\gamma$  ajoute une sensibilité aux effets de vitesse du même ordre que celle observée expérimentalement.

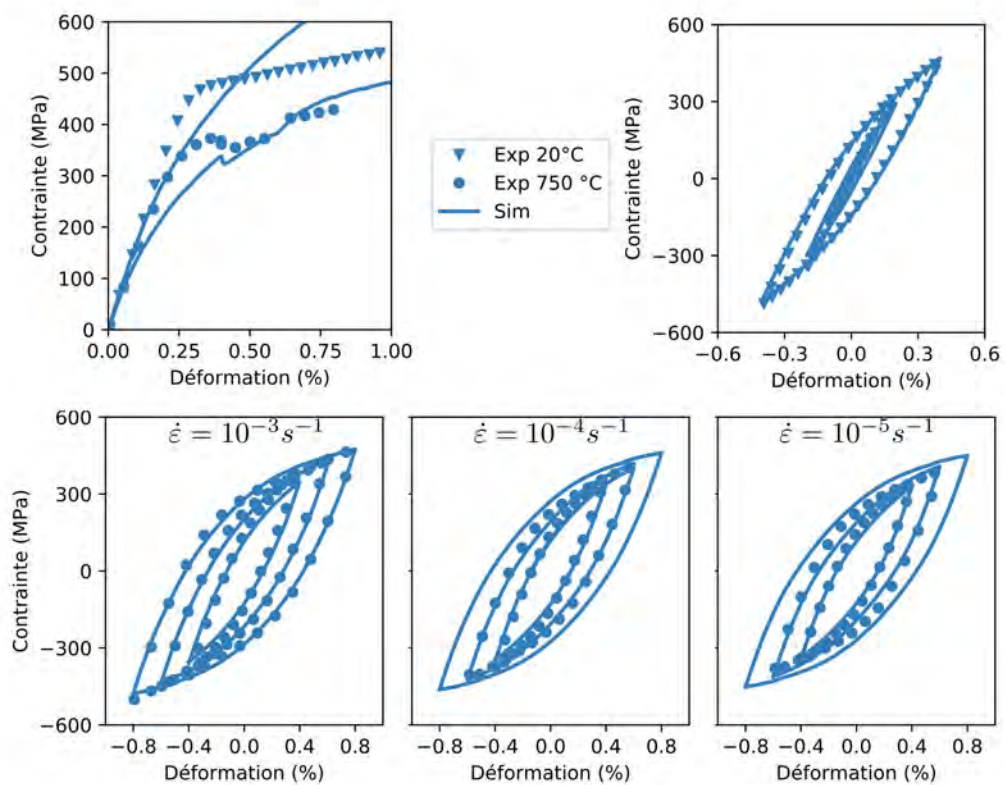


FIGURE 4.19 – Résultats de l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline pour la modélisation du comportement de la microstructure duplex. Pour certaines vitesses, le cycle stabilisé expérimental à  $\Delta\epsilon/2=0,6\%$  n'est pas disponible.

### 4.3.3 Discussion & perspectives

À l'exception des comportements en traction à 20 °C des microstructures presque- $\gamma$  et duplex, les principaux comportements élasto-visco-plastiques à 20 °C et à 750 °C que l'on peut obtenir à partir d'alliages TiAl ont été modélisés avec succès grâce à la démarche proposée. Ce résultat représente une avancée significative vis-à-vis de la littérature, les études étant jusqu'à présent limitées à la traction ou la compression à température ambiante ([chapitre 1](#)).

Les travaux réalisés au chapitre précédent sur monocolonies ont grandement simplifié le processus d'identification des paramètres des colonies lamellaires.

La modélisation du comportement cyclique élasto-visco-plastique de la microstructure duplex sans ajustement de paramètre additionnel démontre l'aspect prédictif de la simulation. On peut ainsi considérer que les comportements de toutes les microstructures comprises entre la microstructure presque-lamellaire et presque- $\gamma$  peuvent être estimés sans avoir à ajuster les paramètres.

Cela représente un des intérêts de l'approche multi-échelles. Avec un modèle macroscopique conventionnel, des paramètres devraient être réajustés pour chaque modification de microstructure. De plus, les boucles d'hystérésis contrainte-déformation macroscopiques sont ici associées à un état local contrainte-déformation et à une description fine de la plasticité. L'accès à cet état local permet une analyse des mécanismes d'amorçage en fatigue à l'échelle de la microstructure comme proposée dans le prochain chapitre.

Différentes pistes d'amélioration plus ou moins difficiles à mettre en œuvre sont envisageables. La modélisation du comportement est limitée ici à des vitesses de déformation  $\dot{\epsilon}$  comprises entre  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$  et  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Une première piste réalisable directement à partir des résultats expérimentaux du [chapitre 2](#) est donc la modélisation du comportement pour les très faibles vitesses de déformation. En effet, les paramètres  $(n, K)$  associés aux effets de vitesse identifiés ici ne suffisent pas à balayer les deux régimes de vitesse [[Coudon, 2017](#)]. On propose donc d'ajouter un deuxième potentiel visqueux  $(n, K)$  à identifier à partir des essais de relaxation. La validation de ce jeu de paramètres se ferait ensuite via la modélisation des essais de fatigue-temps de maintien.

Une autre piste d'amélioration serait de proposer un modèle capable de reproduire l'adoucissement transitoire dans le but de modéliser correctement les comportements en traction à 20 °C des microstructures presque- $\gamma$  et duplex.

Enfin, si les paramètres identifiés ici suivent l'évolution des caractéristiques microstructurales, le modèle utilisé reste phénoménologique. Le passage à un modèle à base physique basé sur une évolution des densités des dislocations et du maillage comme proposé par [[Schnabel et al., 2019](#)] serait intéressant, notamment si celui-ci prend en compte explicitement les effets de taille. Néanmoins, cela nécessiterait la réalisation d'essais micromécaniques avancés pour son identification. Aussi, il semble compliqué de modéliser les comportements de plusieurs centaines de colonies avec ce type modèle. On proposerait plutôt de l'utiliser en complément d'un modèle phénoménologique. La stratégie serait de réaliser des calculs sur un VER avec le modèle phénoménologique, puis de réaliser un zoom dans une colonie ou une zone d'intérêt. À l'échelle de cette colonie ou de cette zone, les caractéristiques microstructurales seraient décrites avec précision (lamelles, domaines, précipités, bordures), et le comportement mécanique des phases en présence serait modélisé avec le modèle à base physique.

## 4.4 Synthèse des résultats

Le comportement mécanique des quatre microstructures génériques des alliages TiAl a été modélisé par calcul éléments finis sur microstructure virtuelle et homogénéisation numérique.

Les outils utilisés pour générer des microstructures virtuelles statistiquement représentatives de celles étudiées ont été présentés. Les calculs éléments finis, tous réalisés avec des conditions aux limites périodiques, représentent le cas d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) au cœur d'une éprouvette sollicitée mécaniquement.

L'identification des paramètres matériaux du modèle de plasticité cristalline se base sur une vision macroscopique via la comparaison des courbes contrainte-déformation numérique et expérimentale. Afin de vérifier que les champs mécaniques obtenus à l'échelle de la microstructure sont représentatifs de ceux observés expérimentalement, un essai micromécanique de traction sur une microstructure totalement-lamellaire est modélisé.

Les résultats ont confirmé que le modèle utilisé et la démarche d'identification permettent de simuler correctement le comportement à l'échelle locale. On retrouve notamment la caractéristique principale de la déformation des microstructures totalement-lamellaires : l'activation séquentielle de la déformation plastique.

La démarche validée, le comportement mécanique élasto-visco-plastique des quatre microstructures génériques des alliages TiAl a été modélisé. Une procédure d'identification basée sur l'évolution des caractéristiques microstructurales est proposée. Les comportements sont modélisés avec succès, et l'on montre que la modélisation prédit ceux des microstructures comprises entre la microstructure presque- $\gamma$  et presque-lamellaire.

Les boucles d'hystérésis contrainte-déformation macroscopiques sont alors associées à un état local contrainte-déformation. Ces champs mécaniques locaux peuvent être utilisés pour réaliser une analyse des mécanismes d'amorçage à l'échelle de la microstructure.



## Chapitre 5

# Étude de la fatigue des alliages TiAl par l'analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue

### Résumé :

Dans ce chapitre, la tenue en fatigue des quatre microstructures génériques des alliages TiAl est étudiée au travers d'une étude numérique portant sur l'analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF). Les éléments microstructuraux favorables et défavorables à la tenue en fatigue sont déterminés numériquement. Des perspectives sont ensuite données quant aux possibles applications de la démarche dans le cadre du développement d'un nouvel alliage TiAl, l'alliage IRIS.

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Analyse de la tenue en fatigue des microstructures génériques des alliages TiAl</b>	<b>140</b>
5.1.1	Méthodologie et démarche . . . . .	140
5.1.1.1	Définition du plan d'expérience virtuel . . . . .	141
5.1.1.2	Conditions de calcul . . . . .	142
5.1.1.3	Indicateur de Tenue en Fatigue . . . . .	143
5.1.2	Comparaison de la tenue en fatigue des quatre microstructures génériques des alliages TiAl . . . . .	143
5.1.2.1	Tenue en fatigue à 20 °C . . . . .	143
5.1.2.2	Tenue en fatigue à 750 °C . . . . .	145
5.1.3	Analyse des zones d'amorçage . . . . .	146
5.1.3.1	Microstructure totalement-lamellaire . . . . .	147
5.1.3.2	Microstructure presque- $\gamma$ . . . . .	150
5.1.3.3	Microstructure presque-lamellaire . . . . .	151
5.1.3.4	Microstructure duplex . . . . .	153
5.1.4	Bilan & discussion . . . . .	154
<b>5.2</b>	<b>Vers une prévision de la durée de vie en fatigue de l'alliage IRIS</b>	<b>157</b>
5.2.1	Alliage IRIS : microstructure et comportement mécanique . . . . .	157
5.2.2	Modélisation du comportement de l'alliage IRIS & pistes d'amélioration	159
5.2.3	Vers la prévision de la durée de vie en fatigue par une analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue . . . . .	161
5.2.4	Vers l'utilisation de modèles de fatigue écrits à l'échelle de la microstructure	163

---

## 5.1 Analyse de la tenue en fatigue des microstructures génériques des alliages TiAl

L'étude bibliographique a montré qu'il est possible d'étudier numériquement la tenue en fatigue des matériaux à partir de calculs éléments finis sur microstructure [chapitre 1](#). Les méthodologies existantes reposent sur le principe suivant.

Plusieurs arrangements locaux statistiquement représentatifs d'une même microstructure sont sollicités mécaniquement à différentes amplitudes de déformation. Des Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF, "Fatigue Indicator Parameter" dans la littérature) sont alors calculés sur un cycle donné à partir des champs de contrainte et de déformation. Ces indicateurs permettent d'estimer les forces motrices de la fatigue qui pilotent la durée de vie, en quantifiant la tendance à amorçage de microfissures. Alors, en réalisant cette campagne de calculs sur plusieurs microstructures, il est possible de comparer leur tenue en fatigue respective.

L'objectif de cette section est d'appliquer ce type d'approche au cas des alliages TiAl afin d'enrichir la compréhension du lien entre microstructure et tenue en fatigue. On s'intéresse aux quatre microstructures génériques (presque- $\gamma$ , duplex, presque-lamellaire, totalement-lamellaire) dont le comportement mécanique a été étudié et modélisé précédemment. Les calculs mis en place au [chapitre 4](#) sont utilisés afin d'établir un lien microstructure-tenue en fatigue. On cherche notamment à répondre à différents points soulevés lors de l'étude bibliographique :

- [[Park et al., 2002](#), [Roth and Biermann, 2008](#), [Gloanec et al., 2010](#), [Kruml and Obrtlík, 2014](#)] font état d'une importante influence de l'amplitude de déformation sur la durée de vie des microstructures lamellaires : une faible variation de l'amplitude peut faire basculer soudainement d'un régime de fatigue à grand nombre de cycles à un régime à faible nombre de cycles. Quelle est l'origine de cette dépendance ?
- Les colonies lamellaires favorablement orientées sont-elles des sites d'amorçage privilégiés comme le suggère les résultats des essais micromécaniques ?
- Quel est le rôle des grains  $\gamma$  sur la tenue en fatigue des microstructures presque-lamellaire ?
- Quels sont les sites d'amorçage privilégiés dans les microstructures presque- $\gamma$  et duplex ?

### 5.1.1 Méthodologie et démarche

La méthodologie de calcul proposée par [[Przybyla and McDowell, 2010](#)] pour l'analyse aux valeurs extrêmes des Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF) est reprise. Un schéma explicatif est présenté en [Figure 5.1](#). Comme expliqué au [chapitre 1](#), la méthodologie consiste à étudier  $N$  arrangements statistiquement représentatifs d'une même microstructure  $A$  d'intérêt. Pour chaque arrangement,  $K$  calculs sont réalisés, un pour chaque amplitude de déformation. Les ITF sont ensuite calculés sur un cycle d'intérêt et la valeur extrême (i.e. la plus élevée) est extraite. Une distribution de  $K \times N$  valeurs extrêmes est alors obtenue. Le nombre de calculs à réaliser  $N_{calc}$  est multiplié par le nombre de microstructures étudiées  $N_{micro}$ , et le nombre de températures  $N_{temp}$ . On définit donc  $N_{calc}$  tel que :

$$N_{calc} = N_{micro} \times N_{temp} \times N \times K \quad (5.1)$$

Les paramètres  $N$  et  $K$  doivent être ajustés aux objectifs de l'étude. Par exemple, dans [[Przybyla and McDowell, 2010](#)] l'objectif était de déterminer pour une microstructure les sites potentiels d'amorçage. Les auteurs ont alors réalisé  $N_{calc} = 150$  calculs avec  $N_{micro} = 1$ ,  $N_{temp} = 1$ ,  $N = 50$  et  $K = 3$ . Les paramètres des calculs (maillages, nombre de cycles, modèle de plasticité) sont aussi à prendre en compte dans l'étude de faisabilité car le temps de calcul est important et la quantité de données générées conséquente.

Dans la suite de cette sous-section, les différents paramètres du plan d'expérience virtuel sont définis, discutés et justifiés.

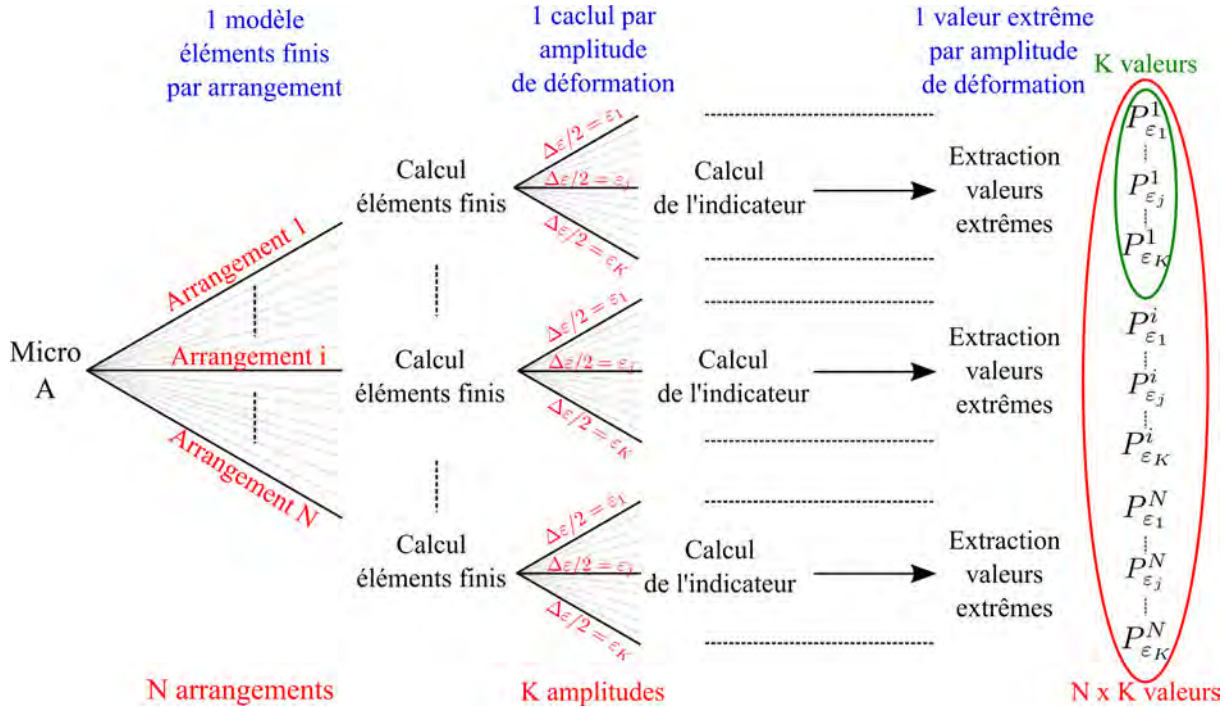


FIGURE 5.1 – Méthodologie de calcul proposée par [Przybyla and McDowell, 2010] pour réaliser une analyse aux valeurs extrêmes. Les explications sont données dans le texte.

### 5.1.1.1 Définition du plan d'expérience virtuel

Les quatre microstructures génériques (presque- $\gamma$ , duplex, presque-lamellaire, totalement-lamellaire) sont étudiées aux deux températures pour lesquelles le comportement a été modélisé, soit 20 °C et 750 °C. On définit donc :  $N_{micro} = 4$  et  $N_{temp} = 2$ . Le nombre d'arrangements  $N$  et le nombre d'amplitudes  $K$  étudiés doivent être ajustés pour répondre aux problématiques matériaux énumérées précédemment.

Dans le cas des alliages TiAl, [Park et al., 2002, Kruml and Obrtlík, 2014] ont montré qu'une légère modification de la déformation appliquée peut faire basculer soudainement d'un régime de fatigue à grand nombre de cycles à un régime à faible nombre de cycles. Le nombre d'amplitudes de déformation est alors privilégié par rapport au nombre d'arrangements étudiés.

En ce qui concerne le nombre d'arrangements étudiés, [Przybyla and McDowell, 2011] ont montré que l'étude de moins de 20 arrangements différents suffit à obtenir une distribution aux valeurs extrêmes permettant l'emploi de lois d'extremum généralisées. Néanmoins, ce nombre peut être diminué lorsque l'on ne cherche pas à déterminer la configuration la plus extrême, mais plutôt à obtenir une idée générale des causes d'amorçage dans la microstructure vis-à-vis de l'ITF utilisé. L'étude d'un nombre important d'arrangements différents est plus adaptée au cas où seule une microstructure est étudiée à une température donnée, par exemple lorsque l'objectif est la prévision de sa durée de vie en fatigue et que la configuration critique est recherchée. Au regard de ces informations, on définit  $N = 10$ . Les résultats sont donc analysés avec une vision mécanicienne et la discussion orientée autour des propriétés du matériau.

Les amplitudes de déformation étudiées sont indiquées dans le Tableau 5.1. À 20 °C, le comportement mécanique des différentes microstructures n'a été étudié que jusqu'à  $\Delta\epsilon/2 = 0,4\%$ . En conséquence, le nombre d'amplitudes de déformation est de  $K^{20\text{ °C}} = 7$  à 20 °C et  $K^{750\text{ °C}} = 9$  à 750 °C. Les chargements appliqués sont alternés  $R_\epsilon = -1$ . La vitesse de déformation est de  $\dot{\epsilon} = 10^{-3} s^{-1}$ . La campagne de simulation représente au total  $N_{calc} = 640$



calculs.

$N_{micro}$	$K$	Température	$\Delta\varepsilon/2$ (%)
4	10	20°	0,10   0,15   0,20   0,25   0,30   0,35   0,40
4	10	750°	0,10   0,15   0,20   0,25   0,30   0,35   0,40   0,50   0,60

TABLEAU 5.1 – Amplitudes de déformation étudiées.

### 5.1.1.2 Conditions de calcul

Les conditions de calculs sont les mêmes que celles définies au chapitre 4. Les microstructures étudiées contiennent 150 grains pour respecter la définition établie du Volume Elementaire Représentatif. Des conditions aux limites périodiques sont utilisées. Les calculs représentent donc le comportement d'un élément de volume au cœur d'une éprouvette (là où il n'y a pas de surface libre).

En ce qui concerne le nombre de cycles à simuler avant de calculer les ITF, différents auteurs rapportent que 5 cycles suffisent à passer une première étape de redistribution plastique [Przybyla and McDowell, 2011, Cruzado et al., 2018, Clark et al., 2019]. Dans notre cas, le cycle stabilisé macroscopique est atteint immédiatement (il n'y a pas de durcissement ni d'adoucissement cyclique). Dans un souci d'économie du temps de calcul et de limitation des données générées, la proposition des auteurs cités précédemment paraît acceptable. Pour chaque calcul, 5 cycles sont donc simulés avant de calculer l'ITF d'intérêt.

Les maillages doivent aussi être adaptés au nombre de calculs à réaliser afin encore une fois de limiter la quantité de données générées et le temps de calcul. [Castelluccio and McDowell, 2015] ont montré que des maillages dans lesquels chaque grain contient en moyenne dix éléments pouvaient être utilisés à condition de travailler sur des grandeurs moyennées par grain. La variabilité des champs mécaniques à l'intérieur d'un grain est alors perdue. Néanmoins, les informations obtenues restent extrêmement riches car les valeurs extrêmes d'ITF peuvent être associées à un grain ( $\gamma$ , lamellaire), son orientation cristalline, et même à son voisinage (i.e. les grains voisins). Comme l'étude réalisée ici est comparative et que les mêmes conditions sont appliquées à toutes les microstructures, cette stratégie apparaît comme un compromis acceptable pour les objectifs visés. On travaillera donc par la suite sur des grandeurs moyennées par grains. En conséquence, dans l'étude ci-après, la microstructure presque- $\gamma$  est simplifiée et ne contient que des grains  $\gamma$  car les grains  $\alpha_2$  et  $\beta_0$  ne peuvent être correctement représentés dans les maillages utilisés du fait de leurs tailles.

Les résultats obtenus ici correspondront donc à une première cartographie générale, déjà riche en informations, de la tenue en fatigue des différentes microstructures génériques, qui pourra ensuite être développée et améliorée dans de futurs travaux. Des pistes sont données à cet effet à la fin de la section.

Il est intéressant de noter que les résultats obtenus ici via calculs éléments finis et moyennés par grains se rapprochent des résultats que l'on pourrait obtenir avec une méthode d'homogénéisation à champs moyens. Néanmoins, dans les schémas d'homogénéisation auto-cohérents classiques, un grain avec une orientation donnée est inclus dans un milieu homogène équivalent qui correspond à une moyenne de la microstructure. Il y a donc la plupart du temps peu de variabilité liée au voisinage dudit grain. Ici, la réalisation de calculs sur microstructures permet d'accéder à cette variabilité liée au voisinage, grâce à l'étude de différents arrangements d'une même microstructure. Le même type d'études pourraient néanmoins être réalisé avec un schéma d'homogénéisation qui tiendrait compte de cette variabilité.

### 5.1.1.3 Indicateur de Tenue en Fatigue

Différents ITF ont été proposés dans la littérature. Lors de l'étude bibliographique (chapitre 1), il a été déterminé que des tendances similaires étaient obtenues quelque soit l'ITF utilisé. On choisit ici d'utiliser l'ITF de Fatemi-Socie  $P_{FS}$  que l'on retrouve régulièrement dans la littérature.

Calculer cet ITF consiste à déterminer le plan contenant l'amplitude de cisaillement maximale au cours d'un cycle  $\Delta\gamma_{max}$ , puis la contrainte normale à ce plan maximale au cours du cycle,  $\sigma_{n,max}$ , tels que :

$$P_{FS} = \frac{\Delta\gamma_{max}^p}{2} \left( 1 + k \frac{\sigma_{max}^n}{\sigma_0} \right) \quad (5.2)$$

avec  $\sigma_0$  la limite d'élasticité en traction et  $k$  un paramètre matériau qui permet d'ajuster la contribution de la contrainte normale.  $k$  est normalement à identifier à partir des résultats d'essais de fatigue uniaxiaux et de torsion [Fatemi and Socie, 1988]. Par exemple, [Jiang et al., 2007] ont déterminé  $k = 0,98$  via une étude macroscopique sur un acier. Dans les études réalisées à l'échelle de la microstructure, il est d'usage d'utiliser  $k = 1$  [McDowell, 2007]. On définit donc  $k = 1$  pour la suite de l'étude.

Le schéma correspondant à l'ITF est présenté en Figure 5.2. Cet ITF est représentatif des mécanismes d'amorçage intralamellaire (i.e. dans une même colonie lamellaire) déterminés au cours de l'étude bibliographique (voir Figure 1.21) et observés expérimentalement au chapitre 2.

L'ITF est calculé en chaque point de Gauss du maillage, puis moyenné grain par grain. Pour chaque calcul, 150 ITF sont donc obtenus. Une valeur élevée d'un ITF indique une faible tenue en fatigue. La valeur extrême (i.e. maximale) de l'ITF dans chaque calcul est ensuite extraite pour obtenir la distribution aux valeurs extrêmes.

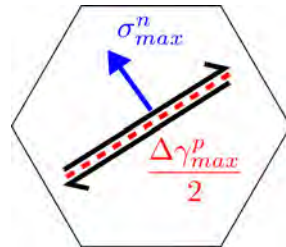


FIGURE 5.2 – Schéma représentant l'ITF de Fatemi-Socie.

Les ITF étant moyennés par grain, les calculs ne sont pas adaptés à l'étude des mécanismes d'amorçage interlamellaire qui sont observables à la frontière entre deux colonies lamellaires adjacentes. Enfin, les calculs représentant le cas d'un élément de volume au cœur d'une éprouvette, il n'y a pas de surface libre. Les phénomènes d'intrusion-extrusion ne sont donc pas étudiés.

## 5.1.2 Comparaison de la tenue en fatigue des quatre microstructures génériques des alliages TiAl

### 5.1.2.1 Tenue en fatigue à 20 °C

Les résultats de la campagne de calculs à 20 °C sont présentés en Figure 5.3. On y représente l'évolution de l'amplitude de déformation  $\Delta\varepsilon/2$  en fonction de l'inverse des valeurs extrêmes d'ITF. Un ITF élevé indique une plus grande chance d'amorçage de fissure, donc une valeur élevée de l'inverse d'un ITF indique une meilleure tenue en fatigue. C'est donc la valeur inverse des ITF qui est présentée afin de se rapprocher des courbes classiques de fatigue. Chaque point sur la figure correspond à la valeur extrême d'un des calculs.

L'étude de différents arrangements locaux permet d'obtenir une dispersion des valeurs extrêmes. La dispersion observée tend à augmenter lorsque l'amplitude de déformation  $\Delta\varepsilon/2$  diminue. En effet, lorsque  $\Delta\varepsilon/2$  est élevée, la déformation plastique est relativement importante et de nombreux grains sont déformés à des niveaux comparables : les caractéristiques microstructurales (phases, distribution de tailles des grains) ont alors peu d'impact sur la tenue en fatigue. Au contraire, lorsque  $\Delta\varepsilon/2$  est faible, peu de grains sont déformés plastiquement : la tenue en fatigue est fortement influencée par les caractéristiques microstructurales. Ces observations rejoignent ce qui est observé expérimentalement lors des études de fatigue dans lesquelles on distingue deux régimes : la fatigue oligocylique (i.e. à faible nombre de cycles) et la fatigue à grand nombre de cycles (voir par exemple [Kruml and Obrtlík, 2014, Cruzado et al., 2018]).

Les régimes de fatigue oligocylique et de fatigue à grand nombre de cycles peuvent être distingués sur le graphique via l'existence de deux tendances claires (pentes indiquées en traits oranges). Ces pentes sont différentes pour  $0,25\% \leq \Delta\varepsilon/2 \leq 0,4\%$  et  $0,1\% \leq \Delta\varepsilon/2 \leq 0,2\%$ . Une analogie avec les deux régimes de Manson-Coffin peut donc être faite. La simulation a permis de prédire ces deux régimes. Dans le cas des alliages TiAl, l'existence de ces deux régimes a bien été prouvé expérimentalement par [Park et al., 2002] et [Kruml and Obrtlík, 2014].

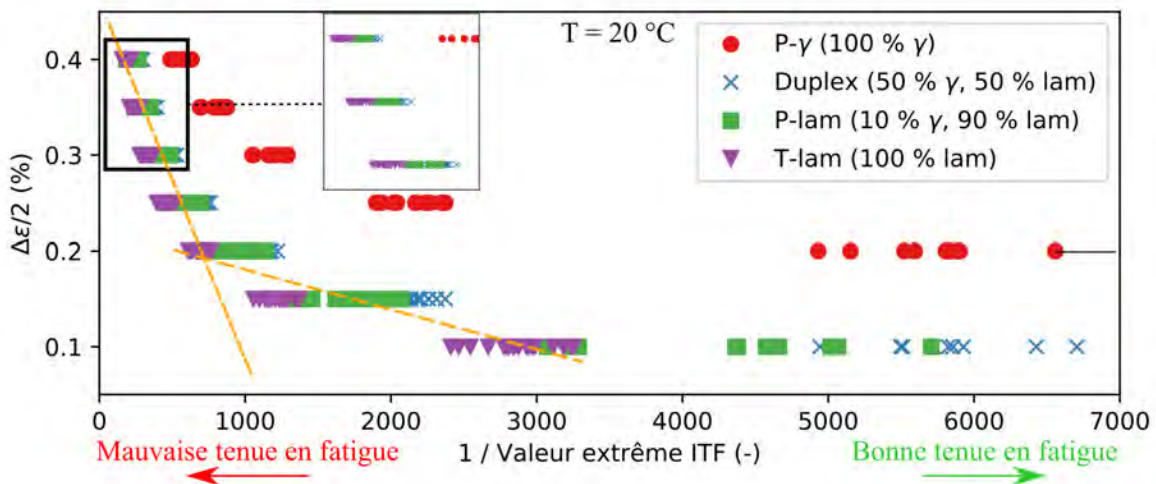


FIGURE 5.3 – Évolution de l'amplitude de déformation en fonction de l'inverse de la valeur extrême des Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF) à 20 °C. Chaque point correspond à la valeur extrême extraite d'un calcul. P-γ, Duplex, P-lam et T-lam font respectivement références aux microstructures presque-γ, duplex, presque-lamellaire et totalement lamellaire.

La comparaison entre les différentes microstructures montre que la microstructure presque-γ a la meilleure tenue en fatigue à 20 °C vis-à-vis de l'ITF étudié car les points rouges sont toujours plus à droite que les autres marqueurs. Par ordre décroissant, cette microstructure est suivie de la microstructure duplex (croix bleues), de la microstructure presque-lamellaire (carrés verts) puis de la microstructure totalement lamellaire (triangles magenta). On peut donc en conclure qu'augmenter la fraction volumique de grains  $\gamma$  améliore la tenue en fatigue.

Enfin, il semble que les microstructures duplex et presque-lamellaire présentent plus de dispersion que la microstructure lamellaire notamment pour  $\Delta\varepsilon/2 = 0,1\%$ . L'aspect multiphasé de ces microstructures est possiblement à l'origine de cette dispersion.

### 5.1.2.2 Tenue en fatigue à 750 °C

Les résultats de la campagne de calculs à 750 °C sont présentés en Figure 5.4. Les ITF obtenus sont deux fois plus grands que ceux obtenus à 20 °C (i.e. sur la figure, l'inverse est deux fois plus petit), ce qui signifie que la tenue en fatigue est supposément meilleure à 20 °C. Cette évolution semble logique à première vue pour un matériau métallique car à 750 °C, les limites d'élasticité sont généralement inférieures aux limites d'élasticité à 20 °C. Pour atteindre le même niveau de déformation, une contrainte plus faible est nécessaire, et l'on obtient donc plus de déformation plastique. Cela augmente la valeur de l'ITF de Fatemi-Socie qui dépend principalement du cisaillement plastique maximal au cours d'un cycle  $\Delta\gamma_{max}^p$ . Néanmoins, d'après la littérature, ce résultat n'est pas intuitif dans les cas des alliages TiAl pour des essais pilotés en déformation et doit donc être discuté de façon plus approfondi.

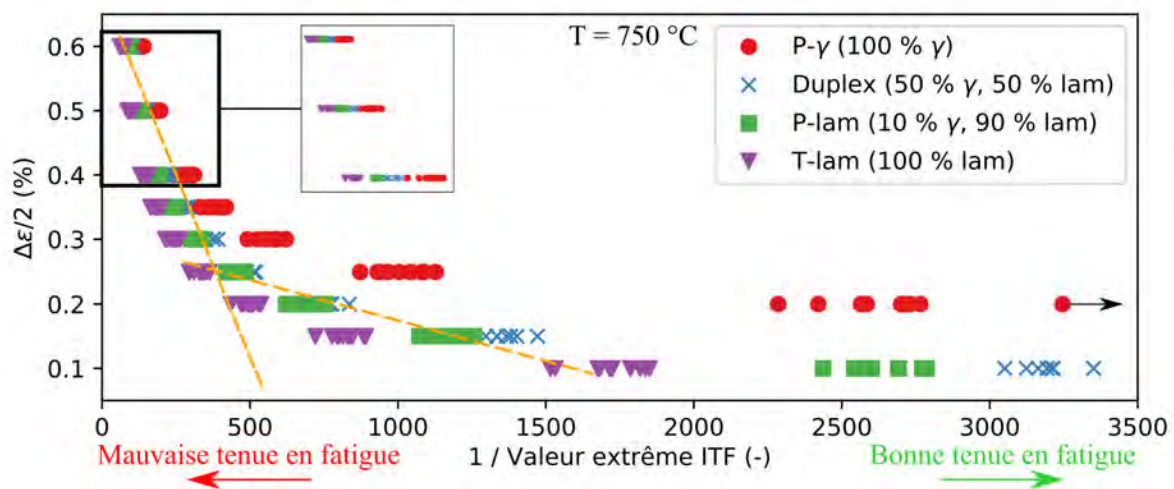


FIGURE 5.4 – Comparaison des distributions aux valeurs extrêmes obtenues pour les différentes microstructures à 750 °C. Chaque point correspond à la valeur extrême extraite d'un calcul. P- $\gamma$ , Duplex, P-lam et T-lam font respectivement références aux microstructures presque- $\gamma$ , duplex, presque-lamellaire et totalement lamellaire.

Parmi d'autres auteurs, [Christ et al., 2001] ont observé via la réalisation d'essais de fatigue pilotés en déformation que la durée de vie des alliages TiAl augmente avec la température lorsque les essais sont réalisés sous air. Par contre, lorsque les essais sont réalisés sous vide, la durée de vie diminue avec la température. Ce résultat a été attribué à des interactions avec l'environnement (vapeur d'eau et corrosion) qui seraient néfastes à basse température et favoriseraient des mécanismes de rupture fragile. Comme les effets d'environnement ne sont pas pris en compte dans nos simulations, il semble logique que ce phénomène ne soit pas retrouvé. On se rapproche donc du cas sous vide, ce qui justifie l'augmentation des valeurs extrêmes d'ITF à 750 °C et la baisse de la tenue en fatigue.

Sur la Figure 5.4, la hiérarchie des microstructures est identique à celle observée à 20 °C. La microstructure presque- $\gamma$  a la meilleure tenue en fatigue, suivie des microstructures duplex, presque-lamellaire et totalement lamellaire.

Les deux pentes que l'on peut associer à deux régimes de fatigue différents sont retrouvées. Pour  $0,4\% \leq \Delta\epsilon/2 \leq 0,6\%$ , les tenues en fatigue des différentes microstructures sont quasiment identiques car les points sont tous groupés. Cela confirme que, pour les niveaux de déformation élevés, les caractéristiques microstructurales (phases, distribution de tailles des grains) ont peu d'impact sur la tenue en fatigue.

À  $\Delta\varepsilon/2 = 0,1\%$ , la dispersion observée pour les microstructures presque-lamellaire et duplex est moins importante qu'à  $20\text{ }^\circ\text{C}$ . Cela peut être un signe d'une déformation locale moins hétérogène. Cette hypothèse doit être discutée en analysant les origines microstructurales de ces valeurs extrêmes. Aussi, la notion de dispersion doit être discutée avec parcimonie car le nombre d'arrangements différents étudiés par microstructure n'est pas élevé.

Les résultats ont été jusqu'ici discutés au travers de l'amplitude de déformation. Néanmoins, pour atteindre le même niveau de déformation, la contrainte maximale appliquée est différente selon la microstructure étudiée. L'évolution de la contrainte maximale appliquée à l'arrangement considéré en fonction de l'inverse de la valeur extrême de l'ITF est présentée en Figure 5.5.

Les observations sont similaires à celles réalisées sur les figures précédentes. Une légère modification du niveau de contrainte peut faire basculer d'un régime de fatigue à un autre. Par contre, cette figure montre que le niveau de contrainte à appliquer à la microstructure presque- $\gamma$  pour atteindre les différents niveaux de déformation est bien supérieur à celui des autres microstructures.

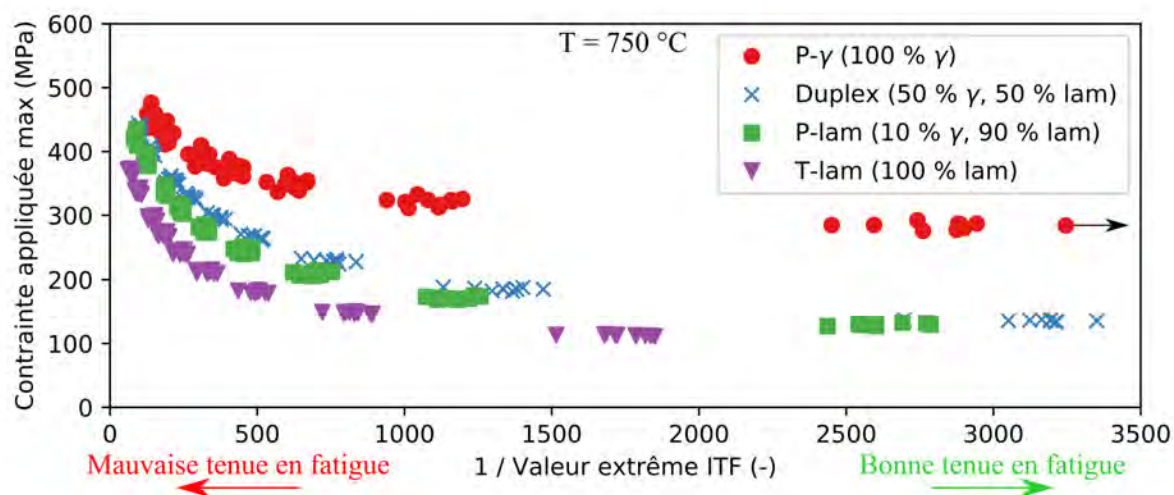


FIGURE 5.5 – Évolution de la contrainte maximale appliquée à l'arrangement étudié en fonction de l'inverse de la valeur extrême pour les différentes microstructures à  $750\text{ }^\circ\text{C}$ . Chaque point correspond à la valeur extrême d'ITF extraite d'un calcul. P- $\gamma$ , Duplex, P-lam et T-lam font respectivement références aux microstructures presque- $\gamma$ , duplex, presque-lamellaire et totalement lamellaire.

### 5.1.3 Analyse des zones d'amorçage

On propose d'étudier les valeurs extrêmes présentées en Figure 5.3 et Figure 5.4 en les reliant à leurs attributs microstructuraux. Les valeurs étant moyennées par grain, une valeur extrême peut être associée à un grain ou à une colonie lamellaire, à son orientation et à son voisinage. Les différentes microstructures sont étudiées et les résultats obtenus mis au regard de la plasticité des phases constituantes et des observations expérimentales réalisées dans le cadre de ce travail et dans la littérature. Les microstructures totalement-lamellaire et presque- $\gamma$  sont d'abord étudiées afin de déterminer les colonies lamellaires et les grains  $\gamma$  critiques dans des microstructures monophasées. Les cas des microstructures biphasées presque-lamellaire et duplex sont étudiés dans un second temps.

### 5.1.3.1 Microstructure totalement-lamellaire

La microstructure totalement-lamellaire contient 100 % de colonies lamellaires dont le comportement mécanique est caractérisé par une importante anisotropie plastique. La déformation des colonies est discutée vis-à-vis de trois modes de déformation qui sont activés selon l'orientation du plan d'interface des colonies par rapport à l'axe de chargement (voir chapitre 3).

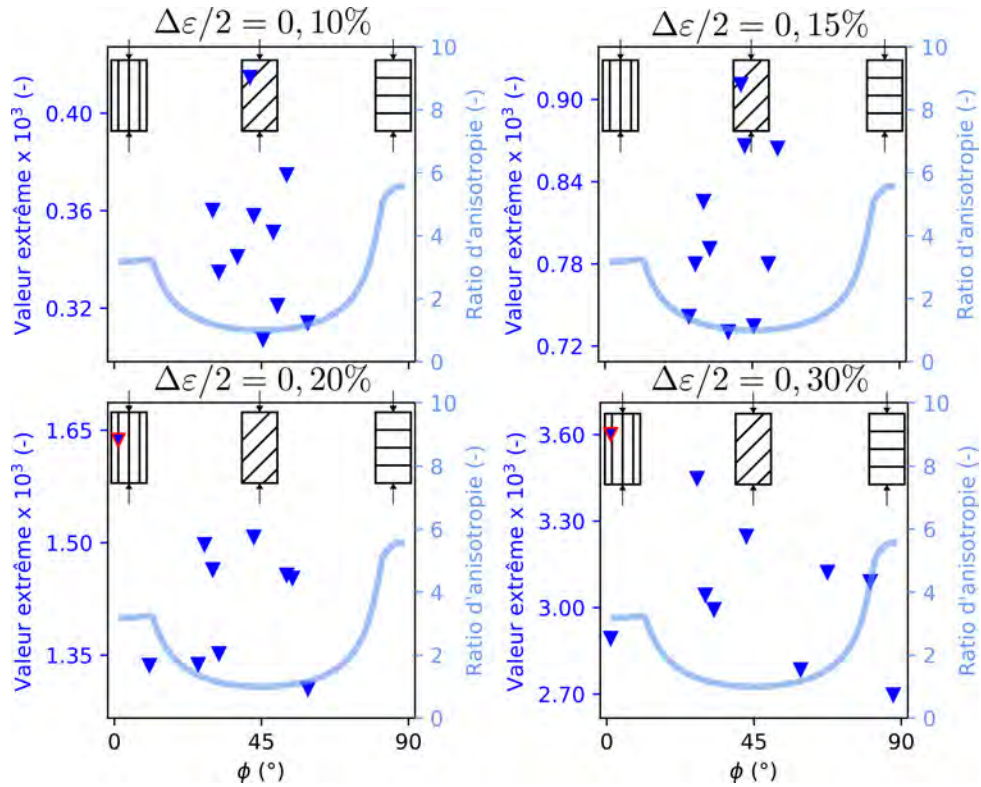


FIGURE 5.6 – Valeurs extrêmes d'ITF à 20 °C pour la microstructure totalement-lamellaire en fonction de l'angle  $\phi$  entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement. L'évolution du ratio d'anisotropie en fonction de  $\phi$  est aussi tracée en bleu clair. Les triangles peu visibles sont entourés de rouge.

L'étude bibliographique (chapitre 1) et les résultats des essais micromécaniques (chapitre 2) suggèrent que les colonies en mode mou pourraient être des sites d'amorçage privilégiés. On propose donc d'analyser les résultats en les confrontant à l'anisotropie plastique et aux modes de déformation des colonies lamellaires.

Sur la Figure 5.6, les valeurs extrêmes d'ITF à 20 °C sont tracées en fonction de l'angle  $\phi$  entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement pour différentes amplitudes de déformation  $\Delta\varepsilon/2$  (triangles bleus). L'évolution du ratio d'anisotropie des colonies lamellaires est aussi tracée (trait bleu clair) pour faciliter la visualisation et la discussion. Si les triangles sont dans le puits du U, les valeurs correspondent à des colonies en mode mou. Si les triangles sont sur la partie supérieure gauche ou droite du U, les valeurs correspondent respectivement à des colonies en mode mixte ou en mode dur.

Pour  $\Delta\varepsilon/2 = 0, 10\%$  et  $\Delta\varepsilon/2 = 0, 15\%$ , les valeurs extrêmes correspondent exclusivement à des colonies orientées en mode mou (puits du U du ratio d'anisotropie). À partir de  $\Delta\varepsilon/2 = 0, 20\%$ , des valeurs extrêmes d'ITF correspondant maintenant à des colonies orientées en mode mixte apparaissent. À  $\Delta\varepsilon/2 = 0, 30\%$ , des valeurs extrêmes sont aussi associées aux colonies en mode dur (perpendiculaire). La tendance se confirme pour les amplitudes de déformation

supérieures (NB : tous les graphiques n'ont pu être montré ici mais sont présentés en annexe C).

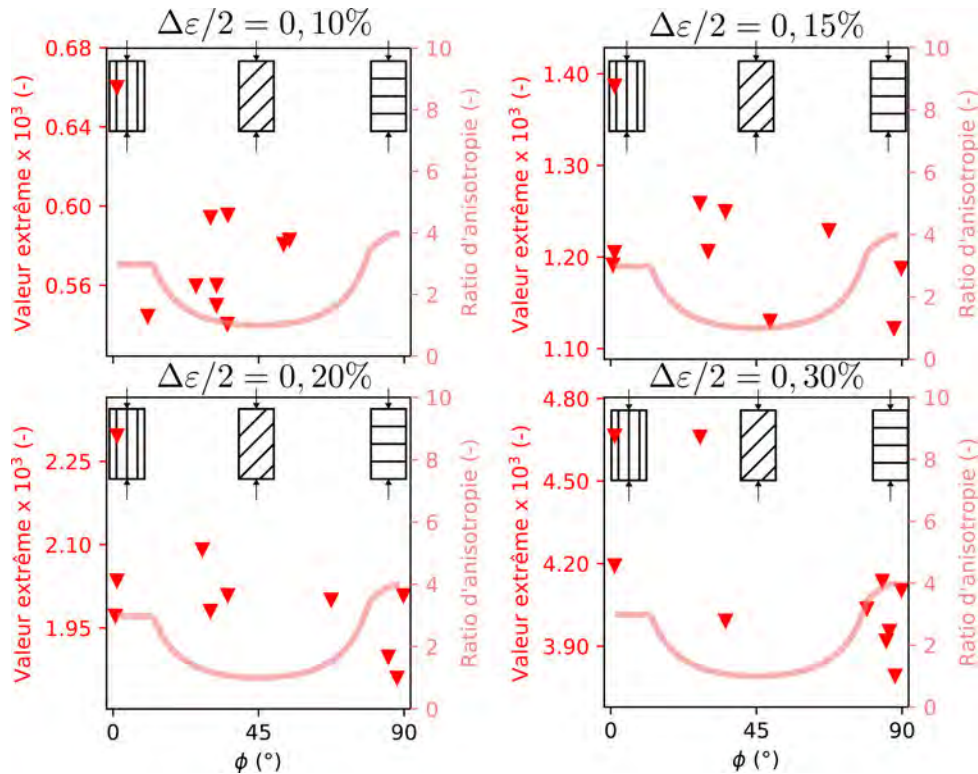


FIGURE 5.7 – Valeurs extrêmes d'ITF à 750 °C pour la microstructure totalement lamellaire en fonction de l'angle  $\phi$  entre le plan d'interface lamellaire et l'axe de chargement. L'évolution du ratio d'anisotropie en fonction de  $\phi$  est aussi tracée.

Sur la Figure 5.7, les mêmes graphiques sont cette fois tracés pour les valeurs extrêmes d'ITF à 750 °C. À cette température, l'anisotropie des colonies diminue. La limite d'élasticité des colonies en mode dur ( $\phi = 90^\circ$ ) est 4 fois supérieure à celle des colonies en mode mou ( $\phi = 45^\circ$ ), alors qu'elle est 6 fois supérieure à 20 °C.

À  $\Delta\epsilon/2 = 0,10\%$  et  $\Delta\epsilon/2 = 0,15\%$ , les valeurs extrêmes ne correspondent plus exclusivement à des colonies en mode mou, mais aussi à des colonies en mode mixte. À partir de  $\Delta\epsilon/2 = 0,15\%$ , les valeurs extrêmes sont déjà réparties entre toutes les colonies. À  $\Delta\epsilon/2 = 0,30\%$ , la plupart des valeurs extrêmes sont issues de colonies en mode dur.

Afin d'enrichir la discussion, il est intéressant de regarder si la colonie identifiée comme critique dépend du chargement appliqué et de la température. Pour cela, l'évolution du numéro de la colonie critique en fonction de l'amplitude de déformation est présentée en Figure 5.8 pour les différents calculs. Sur ce graphique, les numéros "A" désignent les calculs réalisés sur les différents arrangements.

Par exemple, sur la ligne A1 qui correspond à l'arrangement 1, on observe à 20 °C que la courbe est constante et correspond à la colonie 137 pour toutes les amplitudes de déformation : la même colonie est critique pour tous les chargements. Toujours pour l'arrangement 1, à 750 °C, la colonie critique est cette fois la 113 pour tous les chargements.

Si l'on regarde maintenant la ligne A2 qui correspond à l'arrangement 2, à 20 °C la colonie critique n'est pas la même pour toutes les amplitudes de déformation. Jusqu'à 0,15 %, c'est la colonie 14 qui est critique. De 0,20 % à 0,35 % c'est la colonie 111, puis à 0,40 % c'est la colonie 128.

Après avoir procédé à la même analyse pour tous les arrangements, on observe donc que pour

certain calculs, la même colonie est critique pour toutes les amplitudes mais que cela n'est pas une généralité. De même, la ou les colonies identifiées comme critiques ne sont pas nécessairement les mêmes à 20 °C et 750 °C. Cela signifie que pour un même arrangement, l'évolution des paramètres matériaux (cissions critiques, écrouissages, ratio d'anisotropie) entraîne une modification des champs mécaniques locaux et amène à l'identification de nouvelles zones d'amorçage.

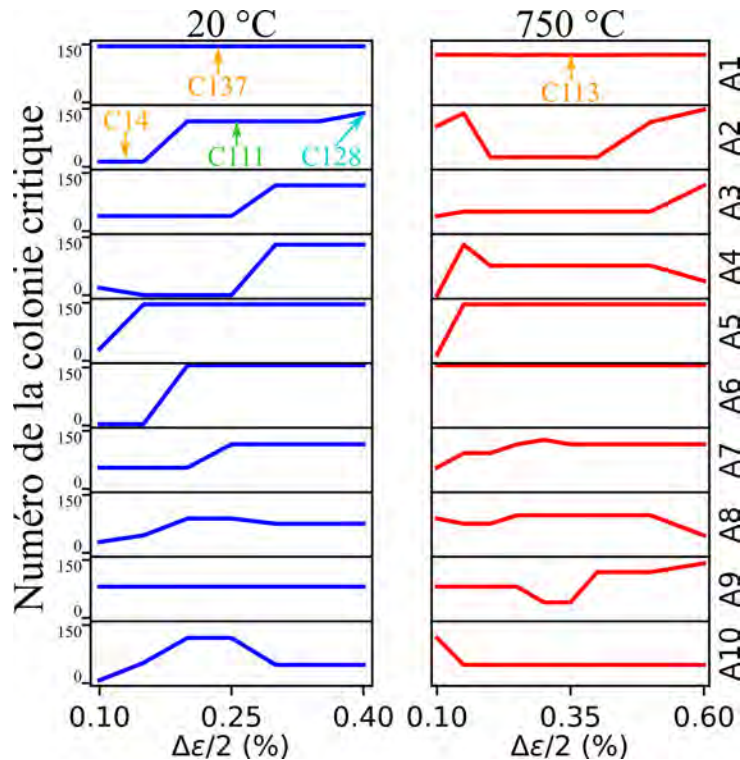


FIGURE 5.8 – Évolution de la colonie associée à la valeur extrême de l'ITF en fonction de l'amplitude de déformation dans les différents calculs réalisés pour la microstructure totalement-lamellaire. L'axe Y est le numéro de la colonie qui évolue de 1 à 150. Les lignes "AX" désignent les calculs réalisés sur les différents arrangements. Les numéros des colonies désignés "CX" sont discutés dans le texte pour aider à la compréhension du graphique.

On cherche maintenant à déterminer s'il existe un lien entre la taille des colonies et la valeur extrême des ITF. Pour cela, l'évolution du diamètre équivalent  $D_{eq}$  des colonies critiques en fonction de l'amplitude de déformation est présentée en Figure 5.9. Chaque triangle correspond au diamètre équivalent d'une colonie critique, c'est-à-dire associée à une valeur extrême d'ITF. À 20 °C, la moyenne des diamètres équivalents des colonies critiques (indiquée par la ligne bleue) est très légèrement inférieure à la taille moyenne des colonies dans la microstructure (ligne noire). À 750 °C, la moyenne des diamètres équivalents des colonies critiques (indiquée par la ligne rouge) est quasiment égale à la taille moyenne des colonies (ligne noire). À 20 °C, la taille des colonies critiques semble plus éparées qu'à 750 °C. À la vue de ces résultats, aucun lien entre la taille des colonies et la valeur extrême de l'ITF ne peut être établi. Il est probable que l'étude d'un plus grand nombre d'arrangements pourrait permettre de conclure sur ce point.

En conclusion, dans le cas de la microstructure totalement-lamellaire, la valeur extrême de l'ITF est d'abord associée à l'anisotropie plastique des colonies lamellaires. Ce résultat explique pourquoi [Park et al., 2002, Kruml and Obrtlík, 2014] ont observé qu'une légère modification de l'amplitude de déformation peut faire passer soudainement d'un régime de fatigue à grand nombre de cycles à un régime oligocyclique. L'anisotropie plastique des colonies lamellaires



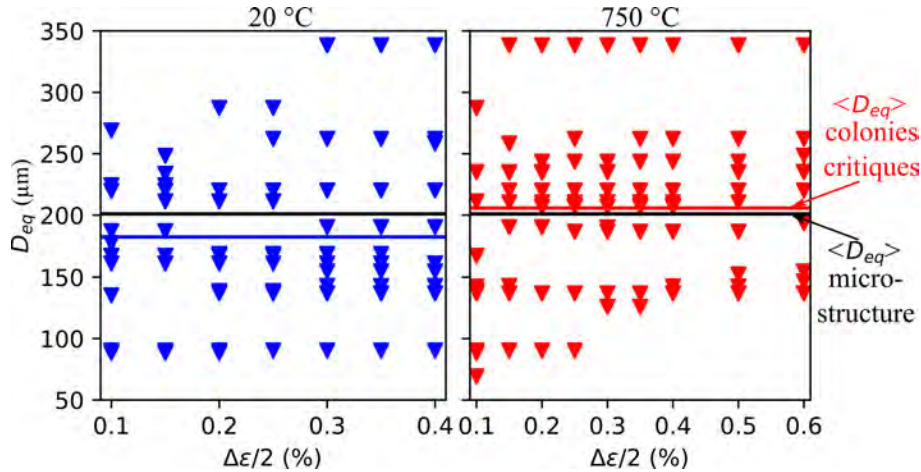


FIGURE 5.9 – Évolution du diamètre équivalent  $D_{eq}$  des colonies critiques en fonction de l’amplitude de déformation. La ligne noire désigne le diamètre équivalent moyen  $\langle D_{eq} \rangle$  des colonies de la microstructure, les lignes bleue et rouge désignent le  $\langle D_{eq} \rangle$  des colonies critiques (i.e. associées à des valeurs extrêmes d’ITF).

étant importante, seules les colonies en mode mou se déforment plastiquement pour de faibles chargement. La durée de vie est alors pilotée par ces colonies, et l’on peut estimer que l’on se situe dans un régime de fatigue à grande durée de vie. Une légère augmentation de la déformation appliquée entraîne ensuite la déformation des colonies orientées en mode mixte puis en mode dur qui deviennent alors aussi des sites d’amorçage privilégiés, notamment car leur état de contrainte est important. La durée de vie en fatigue est alors réduite et l’on entre dans le domaine de la fatigue oligocyclique. Cette conclusion est en accord avec les différentes observations expérimentales de la littérature (chapitre 1) et les résultats des essais micromécaniques réalisés dans ce travail (chapitre 2).

### 5.1.3.2 Microstructure presque- $\gamma$

La microstructure presque- $\gamma$  étudiée ici est simplifiée et contient uniquement des grains  $\gamma$ . La distribution des diamètres équivalents de cette microstructure est très étalée (i.e. l’écart entre le grain le plus petit et le plus grand est important). L’anisotropie plastique de la phase  $\gamma$  est mise en évidence en faisant varier l’angle  $\phi$  entre l’axe  $c$  de la structure quadratique et l’axe de chargement (voir chapitre 3). Le ratio d’anisotropie de la phase  $\gamma$  est beaucoup moins prononcé que celui des colonies lamellaires. La même visualisation que pour la microstructure totalement lamellaire est proposée, en associant les grains critiques à leur angle  $\phi$ . Les observations étant identiques pour les résultats à 20 °C et 750 °C, seuls les résultats à 750 °C sont présentés ici (l’ensemble des courbes est disponible en annexe C).

L’évolution des valeurs extrêmes en fonction de  $\phi$  est présentée en Figure 5.10 pour différentes amplitudes de déformation  $\Delta\varepsilon/2$  (points rouges). Le ratio d’anisotropie est aussi représenté (ligne rouge). Le pic du ratio d’anisotropie observé pour  $\phi = 45^\circ$  est causé par l’absence de déformation induite les superdislocations (voir chapitre 3).

Pour  $\Delta\varepsilon/2 = 0,2\%$  et  $\Delta\varepsilon/2 = 0,3\%$ , toutes les valeurs extrêmes sont situées dans le creux du ratio d’anisotropie autour de  $\phi = 60^\circ$ . Pour  $\Delta\varepsilon/2 = 0,4\%$ , des valeurs autour du pic à  $\phi = 45^\circ$  apparaissent, puis la tendance se confirme à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,6\%$ .

Bien que la distribution des diamètres équivalents de cette microstructure soit très étalée, aucune corrélation directe n’a pu être établie entre la taille des grains et la valeur extrême (voir annexe C).

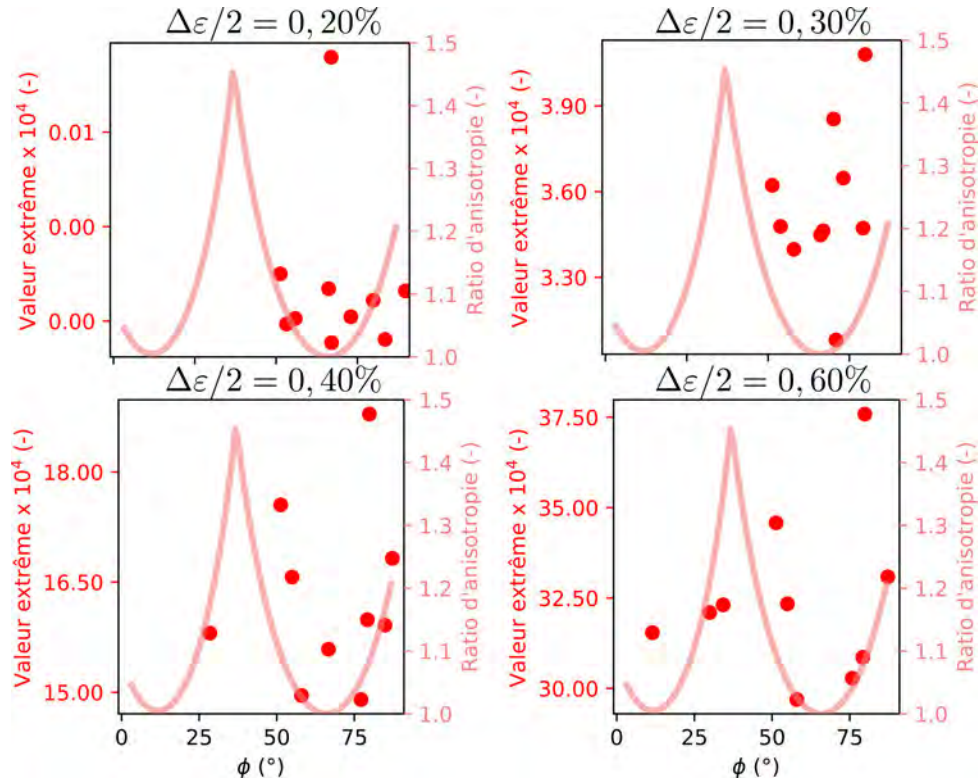


FIGURE 5.10 – Valeurs extrêmes d’ITF à 750 °C pour la microstructure presque- $\gamma$  en fonction de l’angle  $\phi$  entre l’axe  $c$  de la structure quadratique et l’axe de chargement. L’évolution du ratio d’anisotropie en fonction de  $\phi$  est aussi tracée.

Pour résumer, ce sont donc les grains  $\gamma$  les plus favorablement orientés qui pilotent la durée de vie pour les chargements les plus faibles. Lorsque le niveau de chargement augmente, l’influence de l’orientation cristalline diminue et les grains les moins favorablement orientés peuvent aussi devenir des sites critiques. Cette conclusion est similaire à celle réalisée pour la microstructure totalement-lamellaire, alors que l’anisotropie plastique des colonies est beaucoup plus prononcée (ratio de 6 contre 1,5 ici).

Il est intéressant de noter que si les superdislocations avaient été prises en compte comme systèmes de glissement possibles (voir chapitre 3), le pic d’anisotropie à  $\phi = 45^\circ$  n’aurait pas existé et les grains auraient alors pu se déformer dans toutes les directions pour des contraintes faibles. On peut donc affirmer que la prévision de la tenue en fatigue aurait été impactée. Cette prévalence de l’orientation cristalline et de l’anisotropie plastique sur la prévision de la tenue en fatigue démontre que les résultats sont très dépendants du modèle de plasticité cristalline utilisé. Celui-ci doit donc considérer uniquement les modes de déformation observés expérimentalement.

### 5.1.3.3 Microstructure presque-lamellaire

La microstructure presque-lamellaire est constituée à 90 % de colonies lamellaires et 10 % de grains  $\gamma$ . En plus des analyses réalisées précédemment, il est intéressant ici de vérifier si les valeurs extrêmes sont associées à un grain  $\gamma$  ou à une colonie lamellaire.

L’évolution du pourcentage de grains et de colonies lamellaires associés aux valeurs extrêmes à 20 °C et 750 °C en fonction de l’amplitude de déformation est présentée en Figure 5.11. À 20 °C, toutes les valeurs extrêmes correspondent à des colonies lamellaires. À 750 °C, certaines des valeurs extrêmes correspondent à des grains  $\gamma$ . Entre  $\Delta\varepsilon/2 = 0,1\%$  et  $\Delta\varepsilon/2 = 0,3\%$ , les

colonies lamellaires sont les plus représentées. On peut donc affirmer que les colonies lamellaires pilotent la durée de vie pour ce régime de déformation. À partir de  $\Delta\varepsilon/2 = 0,3\%$ , les proportions de valeurs extrêmes issues de grains  $\gamma$  et de colonies lamellaires sont équivalentes. On entre donc dans un régime de compétition entre amorçage sur colonie lamellaire et grain  $\gamma$ .

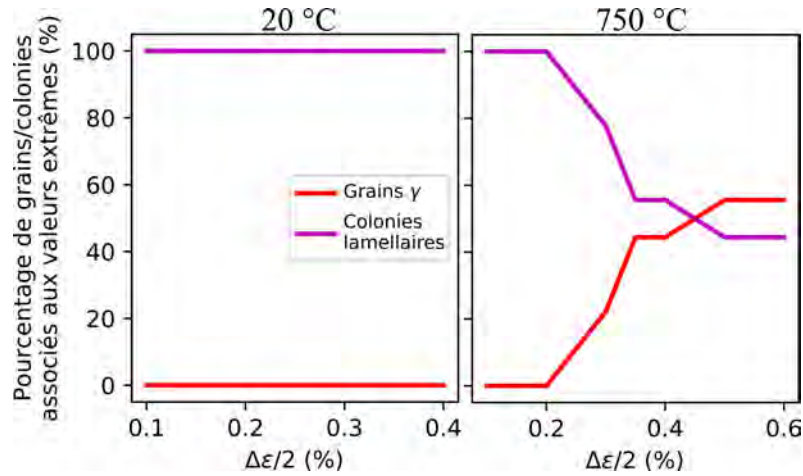


FIGURE 5.11 – Microstructure presque-lamellaire : évolution du pourcentage d’amorçage sur un grain  $\gamma$  ou une colonie lamellaire en fonction de l’amplitude de déformation  $\Delta\varepsilon/2$  à 20 °C et 750 °C.

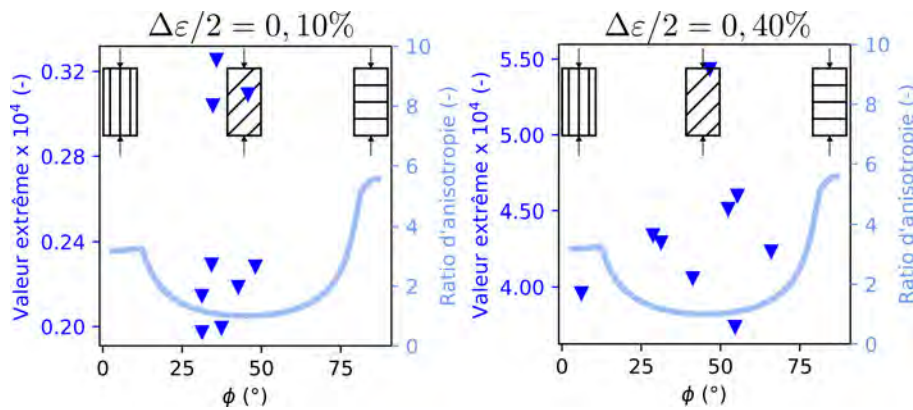


FIGURE 5.12 – Valeurs extrêmes d’ITF à 20 °C pour les colonies lamellaires de la microstructure presque-lamellaire en fonction de l’angle  $\phi$  entre le plan d’interface lamellaire et l’axe de chargement pour différentes amplitudes de déformation  $\Delta\varepsilon/2$ . L’évolution du ratio d’anisotropie en fonction de  $\phi$  est aussi tracée.

Comme précédemment, on propose de visualiser l’évolution des valeurs extrêmes en fonction de l’angle  $\phi$ , d’abord à 20 °C en Figure 5.12. Toutes les valeurs extrêmes correspondent à des colonies lamellaires à cette température. On observe la même chose que pour la microstructure totalement-lamellaire (voir Figure 5.6) : pour les faibles amplitudes de déformation, les colonies en mode mou ( $\phi = 45^\circ$ ) pilotent la durée de vie. Lorsque l’amplitude augmente, seule une colonie en mode mixte (parallèle) est associée à une valeur extrême. Dans le cas de la microstructure totalement-lamellaire, de nombreuses colonies en mode mixte et en mode dur étaient associées à des valeurs extrêmes dans ces conditions. Bien que le nombre d’arrangements différents testés ici soit modeste, on peut supposer que la présence de grains  $\gamma$  permet d’accommoder localement de la déformation, et donc de retarder l’apparition de déformation plastique dans les colonies en mode dur en relaxant localement la contrainte.

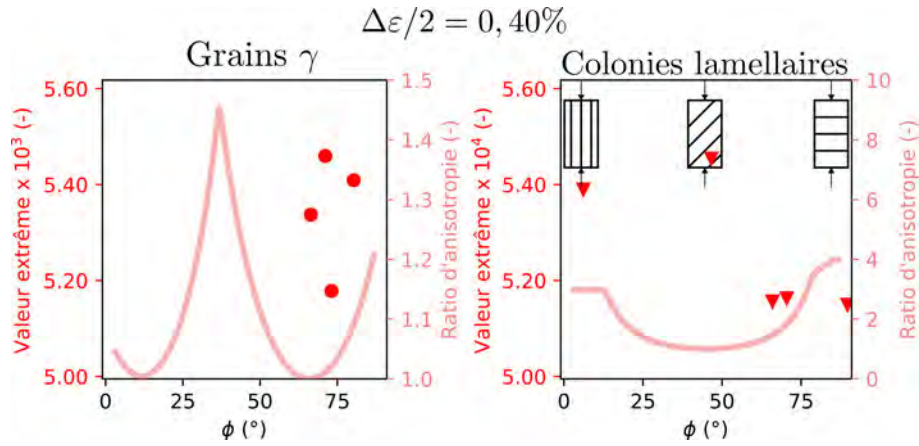


FIGURE 5.13 – Valeurs extrêmes d’ITF à 20 °C pour la microstructure presque-lamellaire en fonction de l’angle  $\phi$  pour  $\Delta\varepsilon/2 = 0,4\%$ . Pour les colonies lamellaire,  $\phi$  est l’angle entre le plan d’interface lamellaire et l’axe de chargement. Pour les grains  $\gamma$ ,  $\phi$  est l’angle entre l’axe  $c$  de la structure quadratique et l’axe de chargement. L’évolution des ratios d’anisotropie en fonction de  $\phi$  est aussi tracée pour les deux phases aussi tracée.

À 750 °C, des valeurs extrêmes correspondent cette fois à des grains  $\gamma$ . L’évolution des valeurs extrêmes en fonction de l’angle  $\phi$  est présentée en Figure 5.13 pour les grains  $\gamma$  et les colonies lamellaires à  $\Delta\varepsilon/2 = 0,4\%$ . Les types d’amorçage sont identiques à ceux discutés pour les microstructure presque- $\gamma$  et totalement-lamellaire. Les grains  $\gamma$  dans le puits du ratio d’anisotropie sont des sites privilégiés, et toutes les colonies lamellaires apparaissent comme des sites d’amorçage à cette amplitude de déformation. Toutes les figures sont présentées en annexe C.

#### 5.1.3.4 Microstructure duplex

La microstructure duplex est constituée à environ 50 % de colonies lamellaires et 50 % de grains  $\gamma$ . Les colonies lamellaires ont des diamètres équivalents légèrement supérieurs à ceux des grains  $\gamma$ .

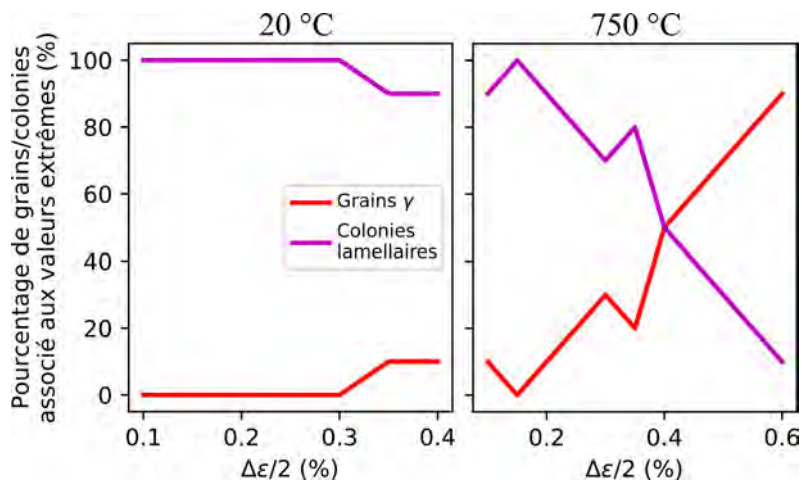


FIGURE 5.14 – Microstructure duplex : évolution du pourcentage d’amorçage sur un grain  $\gamma$  ou une colonie lamellaire en fonction de l’amplitude de déformation  $\Delta\varepsilon/2$  à 20 °C et 750 °C.

L'évolution du pourcentage de grains et de colonies lamellaires associés aux valeurs extrêmes à 20 °C et 750 °C en fonction de l'amplitude de déformation est présentée en [Figure 5.14](#). À 20 °C, des valeurs extrêmes sont associées à des grains  $\gamma$  à partir de  $\Delta\varepsilon/2 = 0,3\%$ . Dans le cas de la microstructure presque-lamellaire, ce n'était pas le cas.

À 750 °C, entre  $\Delta\varepsilon/2 = 0,1\%$  et  $\Delta\varepsilon/2 = 0,3\%$ , les colonies lamellaires sont les plus représentées. On observe néanmoins des oscillations qui peuvent déjà être interprétées comme une compétition entre grains  $\gamma$  et colonies lamellaires. Il est donc nécessaire d'étudier plus d'arrangements différents pour mieux quantifier cette compétition dans ce régime. Entre  $\Delta\varepsilon/2 = 0,3\%$  et  $\Delta\varepsilon/2 = 0,4\%$ , les proportions de valeurs extrêmes issues de grains  $\gamma$  et de colonies lamellaires sont équivalentes. Au-delà, les grains  $\gamma$  les plus favorablement orientés pour la déformation deviennent les sites d'amorçage privilégiés

Les types de grains ou colonies associés aux valeurs extrêmes sont identiques à ceux discutés pour les microstructures totalement-lamellaire, presque-lamellaire et presque- $\gamma$ . Les figures permettant de les mettre en évidence sont présentées en [annexe C](#).

### 5.1.4 Bilan & discussion

#### Bilan des simulations

L'analyse des simulations permet de tirer les conclusions suivantes sur la tenue en fatigue des microstructures des alliages TiAl, pour des chargements  $R_\varepsilon = -1$ , avec une vitesse de déformation de  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$ , et vis-à-vis de l'ITF de Fatemi-Socie :

- la microstructure presque- $\gamma$  présente la meilleure tenue en fatigue, suivie de la microstructure duplex, de la microstructure presque-lamellaire puis lamellaire. Augmenter la fraction volumique de grains  $\gamma$  améliore la tenue en fatigue.
- les colonies lamellaires orientées en mode mou pilotent la tenue en fatigue pour les faibles amplitudes de déformation, et donc pour la fatigue à grand nombre de cycles.
- l'anisotropie plastique prononcée des colonies lamellaires entraîne une activation séquentielle des sites d'amorçage, qui correspondent d'abord à des colonies en mode mou, puis à des colonies en mode dur. Ce résultat explique pourquoi, expérimentalement, [[Park et al., 2002](#), [Roth and Biermann, 2008](#), [Gloanec et al., 2010](#), [Kruml and Obrtlík, 2014](#)] ont fait état d'une importante influence de l'amplitude de déformation sur la durée de vie des microstructures lamellaires.
- pour les grains  $\gamma$ , l'absence de déformation induite par les superdislocations entraîne une anisotropie plastique marquée. Même si celle-ci est largement moins prononcée que pour les colonies lamellaires, elle cause l'apparition d'une orientation cristalline critique pour les grains  $\gamma$ . Les grains avec une orientation proche de cette orientation critique deviennent les sites d'amorçages privilégiés.
- pour les microstructures presque-lamellaire et duplex, les colonies lamellaires pilotent la tenue en fatigue pour les faibles amplitudes de déformation, et donc potentiellement pour la fatigue à grand nombre de cycles. Il y a ensuite une compétition entre amorçage dans les colonies lamellaires et dans les grains  $\gamma$  favorablement orientés.

Il est intéressant de noter que la campagne de calcul a permis d'étudier la tenue en fatigue au cœur du matériau, ce qui est expérimentalement compliqué. Les observations pour les microstructures lamellaires sont bien en accord avec les résultats des essais micromécaniques et les analyses des faciès de rupture de la littérature (voir [chapitre 1](#)). En ce qui concerne les grains  $\gamma$ , les sites d'amorçage n'ont pas été étudiés expérimentalement. Il serait donc intéressant pour de futurs travaux expérimentaux de vérifier les résultats numériques obtenus ici.

Si la campagne de calculs réalisée ici donne clairement une première hiérarchie entre microstructures, jusqu'alors non démontrée dans la littérature, elle ne permet pas de conclure sur l'existence d'une microstructure optimisée pour la fatigue. Typiquement, la microstructure

presque- $\gamma$  est très sensible à la vitesse de déformation. Si les simulations avaient été réalisées avec une vitesse de  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$  à  $750 \text{ °C}$ , le niveau de contrainte à appliquer aurait été plus faible (voir Figure 4.16). La tenue en fatigue de la microstructure presque- $\gamma$  pourrait alors être affectée car la valeur de l'ITF dépend aussi du niveau de contrainte. De même, les essais de fatigue temps de maintien réalisés au chapitre 2 et la discussion associée montrent que cette microstructure n'est pas nécessairement la meilleure pour toutes les conditions de chargement.

En revanche, une microstructure optimisée pour une application donnée pourrait être déterminée avec ce type de campagne de simulation si les chargements étudiés correspondent à ceux vus par le matériau dans ladite application. À ceci s'ajoute les autres contraintes liées à la fabrication de matériau (approvisionnement, procédés, traitements thermiques...).

### Retour vers la métallurgie

Les résultats obtenus peuvent être mis au regard des besoins en termes de développement d'alliages. Une des propriétés essentielles pour les prochaines générations d'alliages TiAl est la fatigue à grand nombre de cycles [Kim and Kim, 2018]. D'après les résultats obtenus ici, la tenue en fatigue à grand nombre de cycles est pilotée par les colonies orientées en mode mou. Une amélioration de la durée de vie pourrait donc être obtenue en les renforçant, c'est-à-dire en modifiant la profondeur du puits de la courbe en U du ratio d'anisotropie.

Plusieurs pistes envisageables pour les alliages polycristallins sont présentées en Figure 5.15. L'idée serait de réduire le libre parcours des dislocations générées lors de la montée en charge. À cet effet, la taille des domaines  $D_{dom}$  pourrait être diminuée. Néanmoins, ce paramètre microstructural semble compliqué à modifier sans affecter l'épaisseur des lamelles  $D_{lam}$ .

Une autre option serait d'ajouter des précipités dans la structure lamellaire. Un alliage au concept proche existe déjà, l'alliage Ti4522XD développé par Rolls-Royce qui contient des particules de boride dans la microstructure. Néanmoins, ces particules sont plus grandes que  $D_{dom}$  et  $D_{lam}$ , et il a été observé expérimentalement par [Edwards et al., 2019a] que celles-ci se fissurent dès les prémices du chargement. Le concept reste donc à prouver.

Au lieu de modifier la profondeur de la courbe en U du ratio d'anisotropie, il est aussi possible de la traduire vers des niveaux de contrainte plus élevés via l'ajout d'éléments lourds (C, Si, W, Nb, Mb, Re...) qui permettent d'augmenter la résistance générale de la microstructure (i.e. le niveau des cisssions critiques).

Une autre piste très intéressante pourrait être le développement d'alliages TiAl à solidification dirigée comme proposé par [Yamaguchi et al., 2000] au début des années 2000, et pour lesquels un regain d'activité est observé (voir par exemple [Lapin and Gabalcová, 2011, Du et al., 2018, Wang et al., 2018]). L'idée est de contrôler les orientations des colonies lamellaires pour que celles-ci soient toutes en mode mixte (i.e. plan d'interface parallèle) vis-à-vis de l'axe de chargement. La forme en U serait alors effacée, et les propriétés mécaniques plus homogènes. On suppose que les propriétés en fatigue seraient alors grandement améliorées par rapport aux alliages traditionnels. Si le gain serait évident à l'échelle d'une éprouvette de laboratoire en sollicitation uniaxiale, l'application de ce type d'alliage à l'échelle d'une pièce soumise à des chargements mécaniques variés serait complexe. Par exemple, les colonies, toutes alignées dans la même direction, pourraient se retrouver en mode dur vis-à-vis de certains efforts transverses, ce qui serait néfaste pour la ductilité. La phase de design d'une pièce serait donc complexe, mais pas impossible car des superalliages à solidification dirigées sont déjà utilisés pour la fabrication d'aubes de turbine basse pression [Coudon, 2017, Coudon et al., 2020].

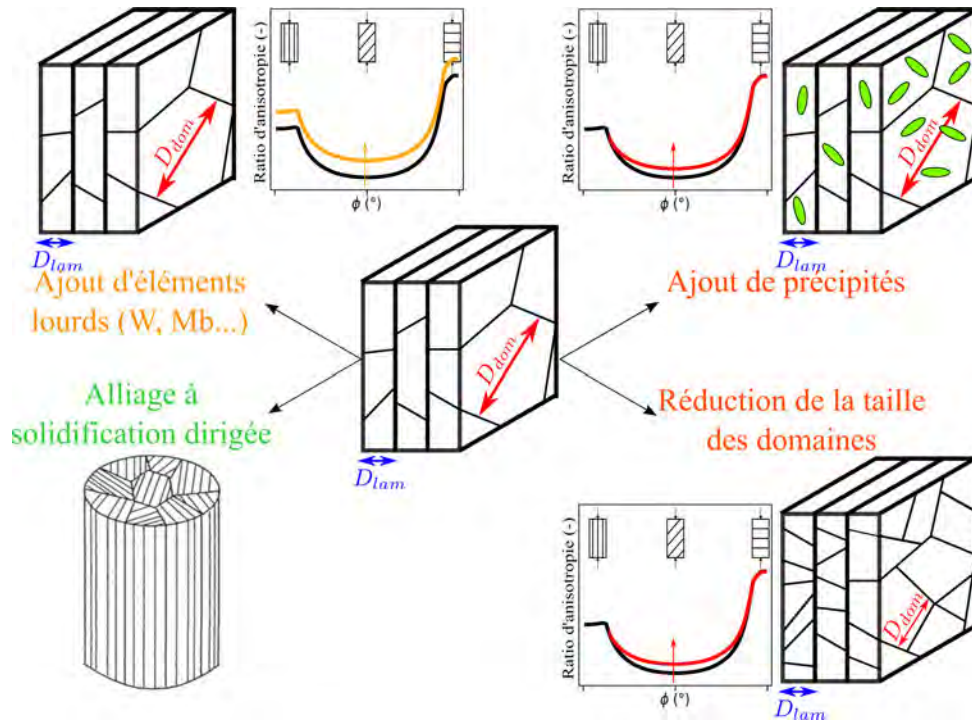


FIGURE 5.15 – Schéma représentant des concepts de modification de la structure lamellaire pour l'amélioration de la tenue à la fatigue à grand nombre de cycles.

### Amélioration de la campagne de calculs

La campagne de calculs pourrait être améliorée dans de futurs travaux. Différentes pistes sont proposées ci-dessous.

Le nombre d'arrangements étudiés pourrait être augmenté afin de conclure sur la dispersion des tenues en fatigue des différentes microstructures. On pense notamment aux cas des microstructures duplex et presque-lamellaire pour lesquelles une compétition entre amorçage sur grains  $\gamma$  et colonies lamellaires a été observée.

La modélisation de cas avec des surfaces libres peut être directement envisagée afin d'étudier et comparer les phénomènes d'intrusion-extrusion pour différentes microstructures. Dans le cas des microstructures lamellaires, il est hautement probable que les colonies en surface orientées en mode mou soient les sites les plus critiques. Les phénomènes observés ici pour le cas des amorçages à cœur pourraient être exacerbés car la déformation n'est plus contrainte par les colonies voisines.

De futurs travaux doivent se concentrer sur l'amélioration de la description géométrique des microstructures. En effet, ici, les contraintes liées au temps de calculs et à la quantité de données générée nous ont poussé à travailler sur des maillages grossiers, et donc avec des grandeurs moyennées par grain. Bien que les résultats obtenus avec cette approche soient déjà très intéressants, les mécanismes d'amorçage intergranulaire n'ont alors pas pu être étudiés. Pour étudier ces mécanismes, des calculs sur des maillages conformes et massifs doivent être réalisés sans compromis. Cette remarque est aussi valable pour différentes études de la littérature dans lesquelles des maillages approximatifs sont aussi utilisés (voir chapitre 1).

À terme, la généralisation de ce type de campagne de calculs pourrait amener à la création de diagrammes d'Ashby basés sur des résultats numériques. En effet, si la même campagne de calculs qu'ici était réalisée sur un autre matériau dont les mécanismes d'amorçage sont aussi représentés par un ITF donné, la tenue en fatigue dudit matériau vis-à-vis de ces mécanismes

pourrait être directement comparée à celle des alliages TiAl. Selon l'application envisagée, le choix se tournerait alors plutôt vers les alliages TiAl ou l'autre matériau. On estime à cet effet que proposer un benchmark ou des normes de calcul serait nécessaire afin de s'assurer que l'ITF obtenu par un auteur A est identique à celui obtenu par un auteur B, et que les résultats sont donc comparables.

Pour compléter, nous avons aussi montré lors de l'étude bibliographique que des analyses aux ITF peuvent être utilisées pour caractériser le rôle d'impuretés liées au procédé (porosités, inclusions) sur la tenue en fatigue d'un matériau.

Enfin, comme introduit lors de l'étude bibliographique ([chapitre 1](#)), ce type de campagne de calculs peut alors être utilisé afin de proposer des modèles de prévision de la durée de vie en fatigue basés sur les mécanismes d'amorçage à l'échelle de la microstructure.

## 5.2 Vers une prévision de la durée de vie en fatigue de l'alliage IRIS

Dans cette section, on propose d'ouvrir sur de futurs travaux en discutant de l'applicabilité d'un modèle de durée de vie basé sur l'analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF) lors de la phase de dimensionnement d'une pièce. Pour cela, on s'intéresse au cas d'un alliage TiAl de nouvelle génération envisagé pour la fabrication d'aubes de turbine basse pression, l'alliage IRIS.

En premier lieu, des résultats préliminaires d'une campagne de fatigue en cours sont utilisés pour mettre en évidence des spécificités de comportement de l'alliage IRIS qui n'ont pas été observées sur l'alliage étudié au [chapitre 2](#). La capacité du modèle utilisé jusqu'à présent à modéliser ces spécificités de comportement est discutée. Des pistes sont ensuite proposées pour le développement d'un modèle de durée de vie basé sur les ITF. Pour conclure, une méthodologie permettant l'utilisation d'un modèle écrit à l'échelle de la microstructure lors de la phase de dimensionnement de pièce est définie.

### 5.2.1 Alliage IRIS : microstructure et comportement mécanique

L'alliage IRIS a été développé dans le cadre de l'ANR du même nom, fruit d'une collaboration entre le CEMES, SafranTech et l'Onera [[Couret et al., 2017](#), [Voisin et al., 2016b](#), [Voisin et al., 2015](#), [Voisin et al., 2016a](#)]. De composition  $\text{Ti}_{49,92}\text{Al}_{48}\text{W}_2\text{B}_{0,08}$ , il est voué à être fabriqué par métallurgie des poudres et frittage flash ("Spark Plasma Sintering" dans la littérature anglo-saxonne). L'alliage dispose d'excellentes propriétés mécaniques en traction et en fluage jusqu'à 800 °C [[Naanani, 2018](#)]. Sa tenue en fatigue est aujourd'hui étudiée dans le cadre du projet FUI EssenTiAl.

Une micrographie MEB de la microstructure après compaction est présentée en [Figure 5.16](#). La microstructure de l'alliage IRIS est constituée de colonies lamellaires relativement petites ( $< 100 \mu\text{m}$ ) autour desquelles on retrouve des bordures constituées de précipités  $\beta_0$  (points blancs) et de grains  $\gamma$  de forme allongée [[Voisin et al., 2016a](#)].

Pour  $R_\varepsilon = -1$ , le comportement cyclique de l'alliage IRIS à 750 °C est identique à celui des microstructures lamellaires étudiées au [chapitre 2](#) [[Naanani, 2018](#)]. En revanche, un nouveau phénomène a été observé à 20 °C.

L'évolution du minimum et du maximum de la contrainte en fonction du nombre de cycle pour un essai de fatigue à  $\Delta\varepsilon = 0,4 \%$  est présentée en [Figure 5.17a](#). Sur cette figure, les valeurs absolues de la contrainte maximale et de la contrainte minimale augmentent. Il y a donc un durcissement cyclique, dont l'origine peut être déterminée par l'analyse des boucles d'hystérésis.

L'évolution de la contrainte en fonction de la déformation plastique pour le premier et le dernier cycle de l'essai est présentée en [Figure 5.17b](#). Les tailles des domaines élastiques sont



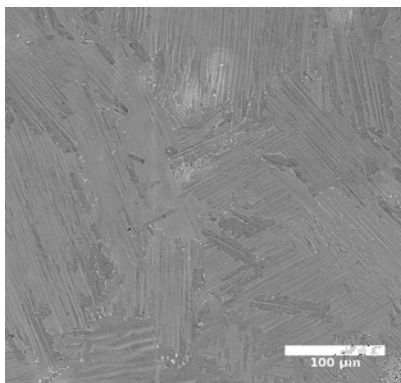
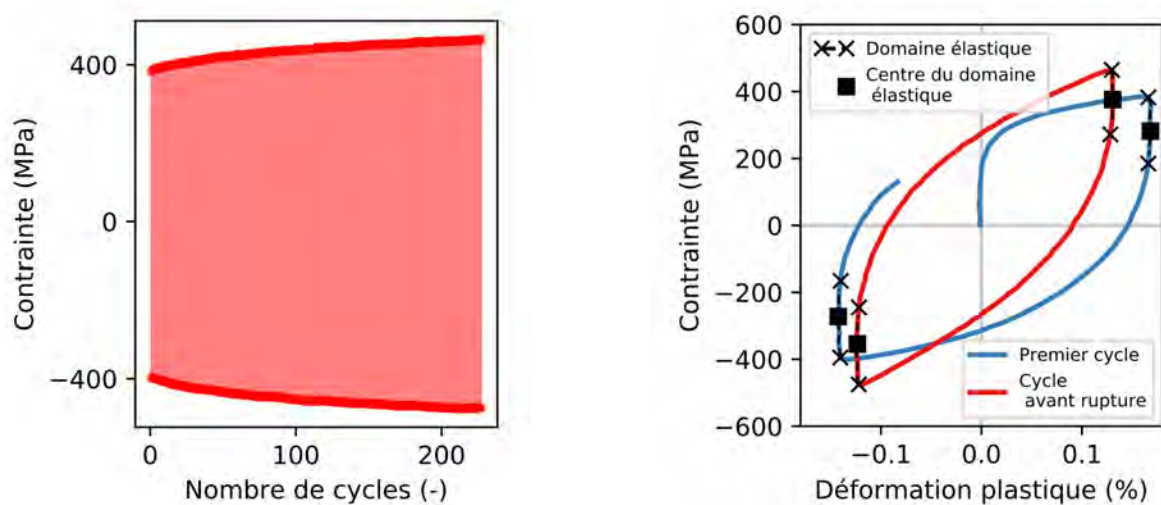


FIGURE 5.16 – Microstructure de l’alliage IRIS après compaction observée au MEB.



(a) Évolution de la contrainte en fonction du nombre de cycles.

(b) Évolution de la contrainte en fonction de la déformation plastique.

FIGURE 5.17 – Comportement cyclique de l’alliage IRIS à 20 °C,  $R_\epsilon = -1$  et  $\dot{\epsilon}^{-1} = 10^{-3} s^{-1}$ .

identiques au début et à la fin de l’essai. Le durcissement n’est donc pas causé par un écrouissage isotrope. Par contre, les positions des centres des domaines élastiques (les carrés) ne sont plus identiques. Le déplacement de ce centre indique que le durcissement cyclique est causé par un écrouissage cinématique qui évolue avec le nombre de cycles.

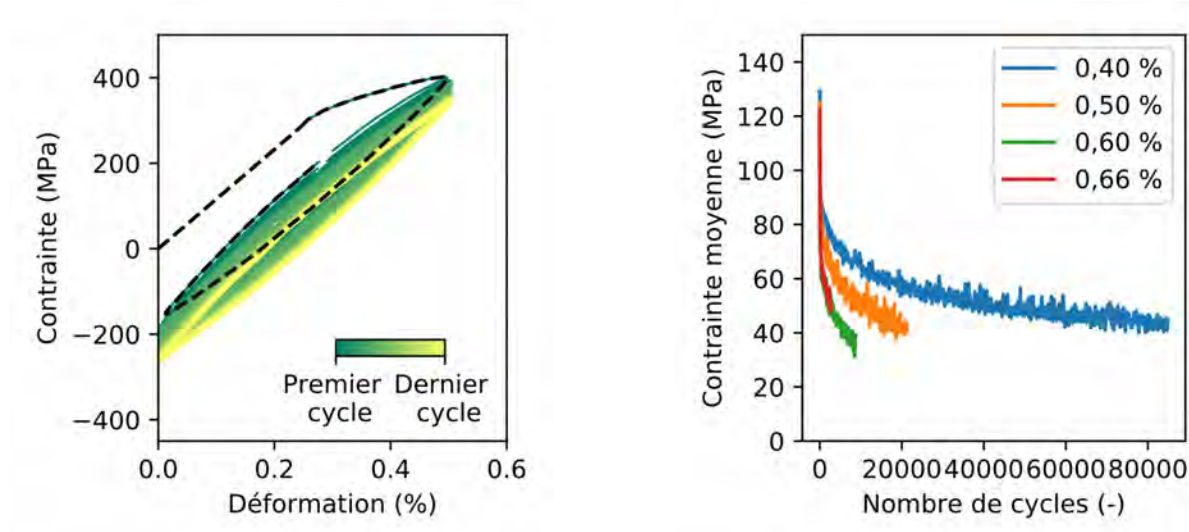
Jusqu’à présent, l’ensemble des essais cycliques présentés ont été réalisés avec des rapports de charge  $R_\epsilon = -1$ . Dans le cadre du projet FUI EssenTiAl, des essais de fatigue ont été réalisés par Safran pour  $R_\epsilon = 0$ . La courbe contrainte-déformation associée à un essai à 0,5 % de déformation appliquée est présentée en Figure 5.18a. Le niveau de contrainte des boucles d’hystérésis diminue avec le nombre de cycles. Ce phénomène peut être associé à une relaxation de la contrainte moyenne  $\sigma_m$  :

$$\sigma_m = \frac{\sigma_{max} + \sigma_{min}}{2} \quad (5.3)$$

avec  $\sigma_{max}$  et  $\sigma_{min}$  les contraintes maximales et minimales au cours du cycle.

L’évolution de la contrainte moyenne pour des essais avec différents niveaux de déformation appliquée est présentée en Figure 5.18b. Pour tous les essais, la contrainte moyenne diminue avec le nombre de cycles jusqu’à la rupture. Cette relaxation de la contrainte moyenne n’était pas

observée lors des essais réalisés avec  $R_\varepsilon = -1$  au cours desquels le cycle stabilisé était atteint immédiatement.



(a) Évolution de la contrainte en fonction de la déformation.

(b) Évolution de la contrainte moyenne en fonction du nombre de cycles.

FIGURE 5.18 – Comportement cyclique de l’alliage IRIS à 750 °C,  $R_\varepsilon = 0$ .

## 5.2.2 Modélisation du comportement de l’alliage IRIS & pistes d’amélioration

Dans le modèle de plasticité cristalline défini au chapitre 3 et utilisé dans nos travaux, la résultante de la vitesse de glissement du système  $s$ ,  $\dot{\gamma}_s$ , s’obtient par la relation :

$$\dot{\gamma}_s = \text{sign}(\tau_s - x_s) \left\langle \frac{|\tau_s - x_s| - \tau_{0,s}}{K_s} \right\rangle^{n_s} = \text{sign}(\tau_s - x_s) \dot{\nu}_s \quad (5.4)$$

avec  $\tau_s$  la cission résolue,  $\tau_{0,s}$  la cission critique résolue  $\tau_{0,s}$ ,  $K_s$  et  $n_s$  des paramètres définissant la viscosité, et  $x_s$  un écrouissage cinématique (voir chapitre 3). Les paramètres du modèle sont identifiés pour modéliser le comportement à 750 °C de l’alliage IRIS en suivant la stratégie définie dans le chapitre précédent et sont indiqués dans le Tableau 5.2. On rappelle que les colonies lamellaires sont considérées insensibles aux effets de vitesse avec  $n^s = 15$  et  $K^s = 1$ .

Paramètre	$\phi_{el}^{lam}$ (-)	$\psi$ (-)	$c$ (MPa)	$d$ (MPa)
Rôle	Module d’Young macroscopique	Taille du domaine élastique		Écrouissage
À 750 °C	0,9	0,45	80000	400

TABLEAU 5.2 – Identification des paramètres de la loi de plasticité cristalline pour l’alliage IRIS.

Les résultats des simulations pour les différentes amplitudes de déformation sont tracés sur la Figure 5.19 (lignes continues et discontinues). Si l’on parvient à décrire globalement la forme des boucles d’hystérésis, la forme du cycle stabilisé (lignes discontinues) est atteinte après seulement cinq cycles contre plusieurs milliers expérimentalement (points verts) : la contrainte moyenne

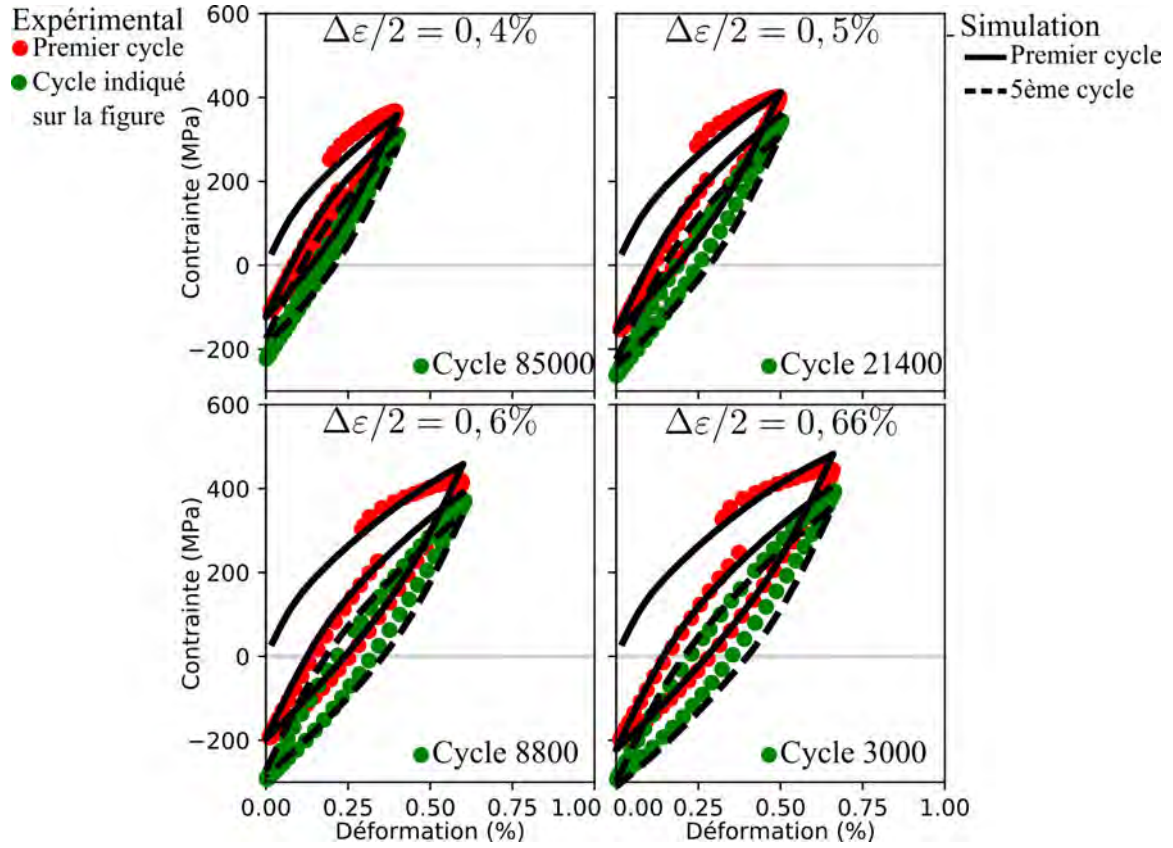


FIGURE 5.19 – Modélisation du comportement cyclique de l’alliage IRIS pour  $R_\epsilon = 0$  et  $\dot{\epsilon}^{-1} = 10^{-3} s^{-1}$ . Les amplitudes de déformation  $\Delta\epsilon/2$  sont indiquées sur les figures.

relaxe beaucoup plus vite dans la simulation qu’expérimentalement. Par ailleurs, lorsque plus de cycles sont simulés, la contrainte moyenne continue de relaxer pour atteindre une valeur moyenne contrairement à ce qui est observé expérimentalement.

C’est un résultat commun dans le cas de la modélisation d’essais avec des rapports de charge non-symétriques lorsqu’une formulation d’écroissage cinématique classique est utilisée [Bari and Hassan, 2000]. Des modifications peuvent être apportées au modèle pour améliorer si besoin la description du comportement.

Le modèle d’écroissage utilisé jusqu’à présent est formulé comme suit :

$$x_s = c\alpha_s \quad \text{avec} \quad \dot{\alpha}_s = (\text{sign}(\tau_s - x_s) - d\alpha_s)\dot{\nu}_s \quad (5.5)$$

Afin de contrôler la vitesse de relaxation de la contrainte moyenne, [Cruzado et al., 2017] suggèrent d’écrire à l’échelle des systèmes de glissement une version simplifiée de la loi d’écroissage cinématique proposée par [Ohno and Wang, 1993] :

$$\dot{x}_s = c\dot{\gamma}_s - dx_s|\dot{\gamma}_s| \left( \frac{|x_s|}{c/d} \right)^k \quad (5.6)$$

avec  $k$  un paramètre permettant de contrôler la vitesse de relaxation de la contrainte moyenne.

Pour finir, une autre modification pourrait être apportée pour modéliser le durcissement cyclique observé lors des essais à 20 °C (Figure 5.17), durcissement qui ne peut pas être représenté avec la formulation d’écroissage cinématique utilisée jusqu’à présent. Afin d’en tenir compte,  $x_s$  peut être modifié pour introduire une dépendance à la plasticité [Zset-Software, 1996, Lemaitre et al., 2009] :

$$\dot{\alpha}_s = \dot{\gamma}\phi(\nu_s) - dx_s|\dot{\gamma}|/c \quad \text{avec} \quad \phi(\nu_s) = (1 - \phi) + \phi e^{-\delta\nu_s} \quad (5.7)$$

où  $\phi(\nu_s)$  est une fonction contrôlée par les paramètres  $\phi$  et  $\delta$  permettant de traduire une évolution de l'érouissage cinématique jusqu'à une valeur saturée (i.e. au cycle stabilisé). Ces différentes modifications sont à envisager pour la poursuite des travaux s'inscrivant dans le cadre du FUI Essential.

### 5.2.3 Vers la prévision de la durée de vie en fatigue par une analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue

Pour ouvrir sur de futurs travaux, on propose de présenter un premier exemple d'application d'une analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF) pour la prévision de la durée de vie en fatigue des alliages TiAl. À cet effet, des données issues de la campagne d'essais réalisée par Safran à  $R_\varepsilon = 0$  sont utilisés. Lors de cette campagne expérimentale, de l'alliage IRIS provenant de fournisseurs variés a été utilisé ce qui a entraîné des différences de niveaux d'amplitude de contrainte entre essais pouvant dépasser 200 MPa. Ces différences de comportement ont alors induit une dispersion importante de la durée de vie en fatigue. L'idée ici n'est donc pas d'obtenir des résultats quantitatifs, mais plutôt de discuter de l'analyse d'ITF à réaliser pour en déduire une durée de vie en fatigue.

La durée vie finale  $N_f$  peut être décomposée comme la somme de la durée de vie à amorçage  $N_a$  et de la phase de propagation d'une fissure longue  $N_p$  ( $\sim 1$  mm). La durée de vie à amorçage  $N_a$  se décompose elle même en deux phases [McDowell and Dunne, 2010] :

$$N_f = N_a + N_p = N_{inc} + N_{mf} + N_p \quad (5.8)$$

avec  $N_{inc}$  et  $N_{mf}$  respectivement les phases d'incubation et de propagation de microfissures (de l'ordre de la taille des grains), qui après coalescence forment une fissure longue se propageant en  $N_p$  cycles. Comme la ténacité des alliages TiAl est très faible, on peut supposer que  $N_f \approx N_a$ .

Les problématiques de fissuration (et à fortiori de fissures courtes) n'étant pas traitées dans notre travail, on s'intéresse à la durée de vie à incubation. [Castelluccio et al., 2016, Yuan et al., 2018, Clark et al., 2019] proposent d'écrire :

$$N_{inc} = \frac{\alpha_g}{d_{gr}} P_{FS}^{-2} \quad (5.9)$$

Avec  $d_{gr}$  une grandeur associée à une longueur caractéristique, typiquement la taille de grain,  $\alpha_g$  un paramètre à identifier et  $P_{FS}^{-2}$  la distribution aux valeurs extrêmes d'ITF. En considérant que  $\alpha_g$  compense  $d_{gr}$ , l'équation peut être simplifiée sous la forme :

$$N_{inc} = A \langle P_{FS} \rangle^{-2} \quad (5.10)$$

avec  $A$  un paramètre à identifier. L'identification inverse se fait à partir des résultats expérimentaux en utilisant  $\langle P_{FS} \rangle$ , la moyenne de la distribution aux valeurs extrêmes.

Une campagne de calculs sur dix arrangements différents a été réalisée pour les conditions d'essais modélisées en Figure 5.19. Cinq cycles sont simulés avant de calculer l'ITF de Fatemi-Socie. La distribution aux valeurs extrêmes obtenues est reliée à la durée de vie expérimentale en estimant que  $N_f \approx N_{inc}$  pour tester l'approche.

Les résultats pour  $A = 0,4$  sont présentés en Figure 5.20, avec à gauche l'évolution de la déformation appliquée en fonction de la durée de vie. On parvient à prédire des durées de vie proches de celles expérimentales. Une dispersion de l'ordre 30000 cycles est récupérée (lignes de couleurs différentes sur le zoom) grâce à l'étude de différents arrangements. Cette dispersion est cependant bien loin de celle observée expérimentalement, en partie pour les raisons données ci-dessus (différences d'amplitude de contrainte entre essais pouvant dépasser 200 MPa).

En effet, bien que l'on étudie différents arrangements locaux d'une même microstructure, leurs réponses macroscopiques contrainte-déformation sont identiques grâce à la définition du VER établie au chapitre 4. La dispersion de comportement liée à l'approvisionnement matière pourrait éventuellement être introduite dans la campagne de simulations en faisant varier aléatoirement d'un calcul à l'autre les valeurs des cisssions critiques ou de l'écroutissage.

Sur la figure de droite, une autre vision des résultats est proposée avec l'évolution de la durée de vie simulée en fonction de la durée de vie expérimentale. Si les points sont sur la droite centrale, les estimations sont justes. Les traits discontinus représentent l'écart considéré comme acceptable (facteur 10). Les résultats obtenus peuvent donc être considérés cohérents. On note néanmoins que l'approche semble plus adaptée à l'étude du régime de durée de vie où  $N_f > 10^4$  cycles, qui est moins dépendant des mécanismes de propagation de fissures longues que le régime oligocyclique [McDowell and Dunne, 2010].

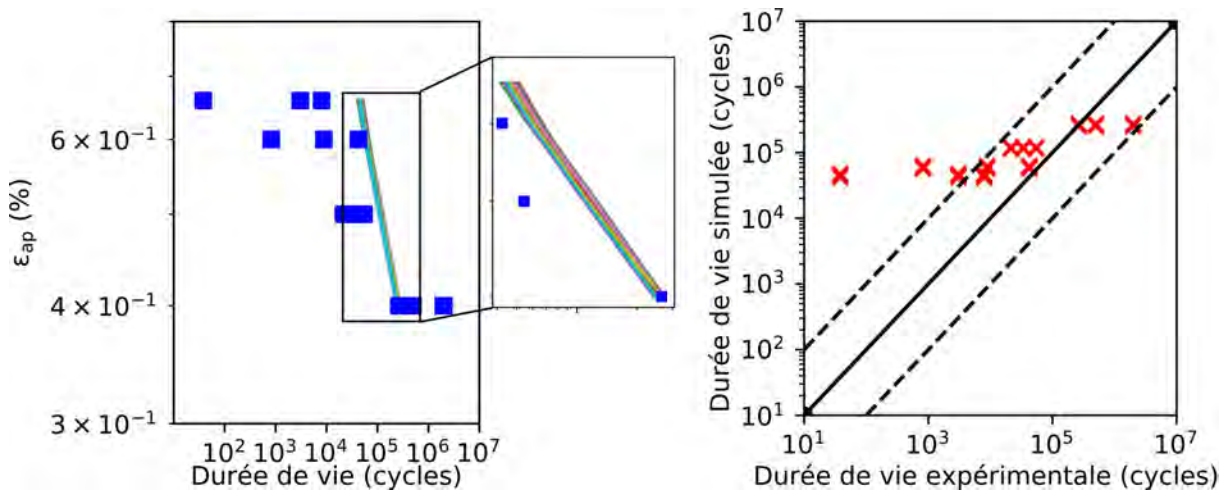


FIGURE 5.20 – À gauche, évolution de la déformation appliquée en fonction de la durée de vie. Les points correspondent aux résultats expérimentaux, les lignes aux résultats de la simulation. Les lignes de différentes couleurs correspondent aux différents arrangements étudiés. Les axes sont en échelle logarithmique. À droite, évolution de la durée de vie simulée en fonction de la durée de vie expérimentale.

La durée de vie à incubation  $N_{inc}$  ne représente qu'une partie de la durée de vie totale  $N_f$ . Bien que peu étudiée dans le cas des alliages TiAl, il est fort probable que la propagation de fissures courtes  $N_{mf}$  représente une partie significative de la durée de vie du matériau suivant le régime de fatigue considéré. Des techniques basées sur la mécanique de la rupture qui permettent d'estimer cette partie de la durée de vie sans modéliser explicitement les fissures ont été proposées [Castelluccio and McDowell, 2014, Yuan et al., 2018].

Par ailleurs, la durée de vie à amorçage des alliages TiAl est une compétition entre les mécanismes se produisant à cœur et en surface [Jha et al., 2005]. Dans de futurs travaux, une analyse d'ITF pourrait donc être réalisée à cœur pour obtenir  $N_{inc}^{cœur}$  et  $N_{mf}^{cœur}$ , puis en surface pour obtenir  $N_{inc}^{surface}$  et  $N_{mf}^{surface}$ , termes qui contiendraient éventuellement un couplage avec des phénomènes d'oxydation. Un traitement probabiliste des résultats avec une approche type maillon faible serait alors réalisé pour représenter la compétition entre les mécanismes [Thieulot-Laure, 2008].

Pour estimer les phénomènes d'intrusion-extrusion en surface, une géométrie d'éprouvette et un plan d'expérience ont été proposés et sont présentés en annexe D. Ces essais n'ont pas pu être réalisés par manque de temps dans le cadre de ce travail.

#### 5.2.4 Vers l'utilisation de modèles de fatigue écrits à l'échelle de la microstructure

Si l'on a montré que les calculs sur microstructure peuvent être directement utilisés pour proposer des modèles de prévision de durée de vie en fatigue, leur utilisation dans le cas de calculs de dimensionnement n'est pas évidente.

Le cas du calcul de dimensionnement d'une aube de turbine est considéré à titre d'exemple. La première approche envisageable consiste à mailler directement la microstructure dans la pièce. Un exemple réalisé en utilisant les outils de Z-cracks (disponibles dans la suite Z-Set [Zset-Software, 1996, Chiaruttini et al., 2013]) est présenté en Figure 5.21. Le résultat est obtenu en réalisant une intersection entre le maillage d'une aube et le maillage d'une microstructure. Si l'insertion de la microstructure dans une géométrie complexe est possible, on observe que la taille des grains n'est pas représentative. Ce type d'approche que l'on peut considérer comme la force brute n'est pas envisageable pour des microstructures où la taille de grains est inférieure au millimètre.

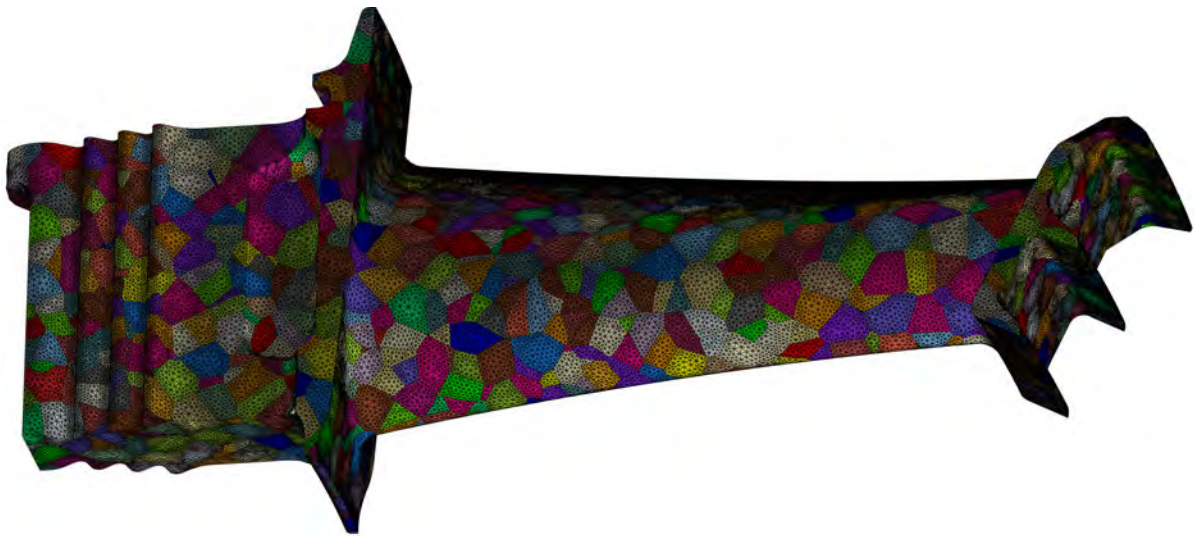


FIGURE 5.21 – Exemple d'un maillage complet d'une microstructure dans une aube de turbine.

On propose donc la démarche globale présentée en Figure 5.22 qui couple analyse macroscopique et analyse microscopique. Un calcul de structure utilisant un modèle de comportement macroscopique phénoménologique est d'abord réalisé pour obtenir les champs de contrainte et de déformation sur la pièce. Des zones critiques à analyser plus en détails sont identifiées au travers d'un modèle macroscopique de durée de vie. Ensuite, de multiples arrangements statistiquement représentatifs de la microstructure du matériau sont générés puis insérés uniquement dans la zone critique à analyser. Pour finir, ces arrangements sont sollicités mécaniquement en récupérant les chargements issus du calcul macroscopique. L'analyse des ITF est ensuite réalisée comme précédemment (section 5.1) et une durée de vie peut être estimée.

Cette démarche suppose d'être capable de modéliser par calcul sur microstructure et homogénéisation numérique des chargements aussi complexes que ceux modélisés avec des modèles de comportement macroscopique. Il faut notamment être à même de retranscrire des chargements de type fatigue-temps de maintien et pouvant être multiaxiaux.

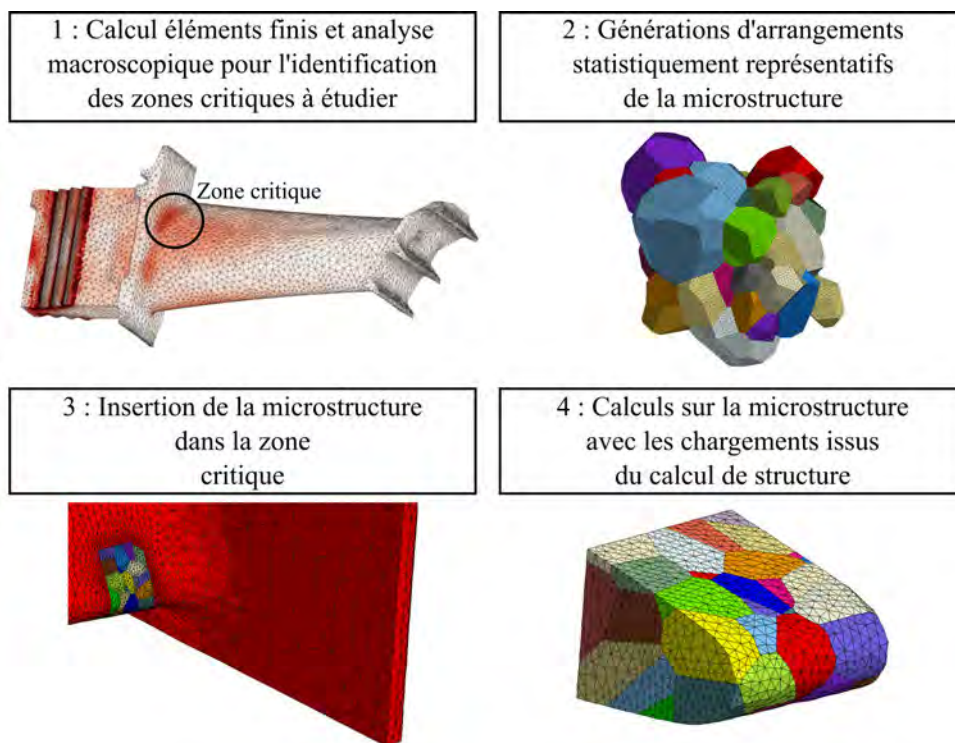


FIGURE 5.22 – Méthodologie de calcul envisagée pour l'utilisation de modèles de fatigue écrits à l'échelle de la microstructure.

# Conclusions & perspectives

## Conclusions

La tenue en fatigue des alliages TiAl a été étudiée via l'analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF). Pour cela, le comportement mécanique cyclique des quatre microstructures génériques a d'abord été caractérisé expérimentalement, puis modélisé par calcul sur microstructure et homogénéisation numérique. Les champs mécaniques locaux dans les microstructures ont alors pu être utilisés pour calculer les ITF. Cette analyse a permis de révéler l'impact des caractéristiques microstructurales sur la tenue en fatigue. Un retour vers la métallurgie a ainsi pu être effectué en proposant des pistes de design d'alliages qui permettraient l'amélioration des propriétés en fatigue.

L'étude macroscopique de la réponse contrainte-déformation des quatre microstructures génériques à 20 °C et 750 °C a montré que les comportements mécaniques observés peuvent être classés en deux catégories, l'une correspondant aux microstructures à forte teneur en grains  $\gamma$ , l'autre correspondant aux microstructures à forte teneur en colonies lamellaires. Les microstructures de la première catégorie présentent une transition élasto-plastique très marquée, voire soudaine, et un adoucissement transitoire prononcé. Les microstructures de la deuxième catégorie présentent une transition élasto-plastique peu marquée et un écrouissage cinématique important. Ces comportements ont été discutés vis-à-vis des mécanismes élémentaires de déformation pour chercher une origine à l'effet Bauschinger observé. Pour compléter, la notion de microstructure optimisée a été discutée au travers de l'analyse d'essais de fatigue-temps de maintien.

La réalisation d'essais micromécaniques a permis de mettre le comportement macroscopique au regard de la déformation dans deux microstructures opposées, la microstructure presque- $\gamma$  et la microstructure totalement-lamellaire. L'essai *in situ* MEB sur la microstructure presque- $\gamma$  n'a pas donné les résultats escomptés à cause d'une rupture prématurée de l'éprouvette. Nous suspectons néanmoins une activation soudaine de la plasticité. En ce qui concerne la microstructure totalement-lamellaire, les résultats des essais réalisés sous caméra montrent que des colonies lamellaires se déforment significativement alors que le comportement macroscopique est élastique. L'anisotropie plastique des colonies entraîne une activation progressive, séquentielle, de la déformation dans la microstructure. Dans le cas de chargements cycliques, un effet Rochet a pu être associé à l'évolution locale de la déformation plastique. Pour des chargements faibles, la plasticité est confinée dans quelques colonies et l'effet Rochet est modéré, tandis que pour des chargements élevés, la plasticité se propage dans toute la microstructure et l'effet Rochet est prononcé.

Les résultats expérimentaux obtenus ont été utilisés pour mettre en place la modélisation multi-échelles du comportement mécanique des alliages TiAl.

En termes de modélisation, la revue bibliographique a montré que peu de travaux portant sur les alliages TiAl ont été réalisés par rapport à d'autres familles des matériaux. L'étude a été adaptée en conséquence dans le but d'étendre la modélisation au cas du comportement cyclique



à 20 °C et 750 °C.

Afin de décrire les comportements des différentes phases cristallographiques présentes dans les microstructures, un modèle de plasticité cristalline phénoménologique a été retenu. Les systèmes de glissement considérés ont été déterminés grâce à l'analyse de travaux de la littérature. Pour les grains  $\gamma$ , l'absence de déformation par les superdislocations crée une anisotropie plastique.

En ce qui concerne les colonies lamellaires, une transition d'échelle analytique a été utilisée afin d'évaluer la plasticité à l'échelle des lamelles. L'approche retenue, qui présente un compromis intéressant vis-à-vis d'autres travaux de la littérature, a été validée via la modélisation du comportement de monocolonies lamellaires. Ce travail a permis de capturer l'anisotropie plastique des colonies via la définition de ratios d'anisotropie à 20 °C et 750 °C. Le passage au cas du polycristal s'en est retrouvé grandement simplifié.

Le comportement mécanique des quatre microstructures génériques des alliages TiAl a été modélisé par calcul éléments finis sur microstructure et homogénéisation numérique. L'identification des paramètres matériaux du modèle de plasticité cristalline a été réalisée à partir des courbes contrainte-déformation macroscopiques.

Néanmoins, la modélisation d'un essai micromécanique de traction a permis de valider la représentativité des champs locaux prédits par le modèle dans le cas d'une microstructure totalement-lamellaire. Il s'agit, à ce jour, de la première confrontation d'une modélisation du comportement des colonies lamellaires à des mesures de champs expérimentales. Les résultats obtenus sont encourageants et la caractéristique principale de la déformation de ces microstructures, l'activation séquentielle de la déformation, est retrouvée. Des données expérimentales additionnelles sont nécessaires pour valider définitivement l'approche.

Les comportements élasto-visco-plastiques des quatre microstructures génériques ont ensuite été modélisés avec succès. Une procédure d'identification des paramètres matériaux basée sur l'évolution des caractéristiques microstructurales a été proposée. On montre notamment que, grâce à l'approche retenue, la modélisation prédit les comportements des microstructures comprises entre les microstructures presque- $\gamma$  et presque-lamellaire. En revanche, on ne parvient pas à modéliser simultanément à 20 °C les comportements en traction et cyclique des microstructures presque- $\gamma$  et duplex. Ce point sera détaillé dans les perspectives.

Une analyse d'Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF) a donc pu être réalisée grâce à la modélisation multi-échelles du comportement cyclique des alliages TiAl. Cette étude a permis de répondre à un certain nombre de points soulevés dans l'étude bibliographique. Par exemple, une hiérarchie de la tenue en fatigue des microstructures génériques des alliages TiAl a été proposée. Nous avons aussi révélé que l'activation séquentielle de la déformation plastique dans les microstructures lamellaires peut entraîner le passage soudain d'un régime à grand nombre de cycles vers un régime à faible nombre de cycles pour une faible variation de l'amplitude de déformation. Il semble également que l'absence de déformation des grains  $\gamma$  par les superdislocations entraîne l'apparition d'une orientation critique, favorable à l'amorçage de fissures.

Un retour vers la métallurgie a été effectué grâce aux résultats en proposant différentes pistes pour l'amélioration de la tenue en fatigue des microstructures contenant des colonies lamellaires. Ces propositions partent du constat que la tenue en fatigue dans les domaines d'intérêt pour la plupart des applications ( $> 10^4$  cycles) est pilotée par les colonies en mode mou.

Enfin, une démarche permettant l'utilisation d'un modèle de fatigue basé sur une analyse d'ITF lors de calculs dimensionnants a été proposée.

## Perspectives

L'amélioration de la modélisation multi-échelles du comportement passe par l'obtention des résultats expérimentaux adéquats. Les essais réalisés dans le cadre de ce travail l'ont tous été avec des rapports de charge  $R_\epsilon = -1$ . Or, l'analyse du comportement de l'alliage IRIS dans le dernier chapitre montre que d'autres phénomènes, non pris en compte à l'heure actuelle dans le modèle, sont observés pour  $R_\epsilon = 0$ . Dans de futures campagnes d'essais, des conditions de chargement plus variées doivent donc être investiguées pour enrichir la base de données et valider l'adéquation du modèle proposé pour décrire le comportement cyclique du matériau.

En ce qui concerne les essais micromécaniques, le cas de la microstructure presque- $\gamma$  doit être repris pour caractériser la déformation locale lors de l'entrée dans le domaine plastique. Il serait aussi intéressant d'étudier des microstructures duplex afin d'analyser expérimentalement la répartition de la déformation entre les grains  $\gamma$  et les grains lamellaires.

Avec le modèle de plasticité cristalline utilisé, nous ne parvenons pas à représenter simultanément à 20 °C les comportements en traction et cyclique des microstructures presque- $\gamma$  et duplex à cause de l'adoucissement transitoire très important observé. Des développements doivent être entrepris pour en tenir compte.

En ce qui concerne la modélisation du comportement des colonies lamellaires, il serait intéressant de comparer les résultats obtenus ici avec la transition d'échelle analytique à ceux obtenus via d'autres méthode multi-échelles afin d'étudier le domaine de validité des différentes approximations. On pense notamment à la méthode des éléments finis imbriqués utilisée par [Kabir et al., 2010].

Des calculs sur des maillages raffinés pourraient être analysés afin d'étudier numériquement la répartition de la déformation dans les microstructures duplex, ainsi que le rôle des phases  $\beta_0$  et  $\alpha_2$  sur les champs mécaniques locaux.

La campagne d'analyse d'ITF réalisée ici s'est limitée au cas d'un amorçage de fissure intergranulaire dans un élément de volume au cœur d'une éprouvette. Des pistes de développement ont été données dans le chapitre 5. Des calculs massifs sur des modèles décrivant de façon détaillée la microstructure doivent être réalisés pour pouvoir analyser les mécanismes intergranulaires.

Le cas de volumes élémentaires représentatifs avec une surface libre pourrait aussi être étudié afin de caractériser les phénomènes d'intrusion-extrusion en surface. Des éprouvettes ont d'ailleurs été conçues pour répondre à ce besoin et permettre la confrontation des simulations à des résultats expérimentaux (annexe D).

Nous avons vu que l'analyse d'ITF réalisée permet de récupérer la durée de vie à incubation. Pour accéder à la durée de vie à initiation, la propagation de microfissures de fatigue doit être étudiée.

Enfin, l'utilisation de ce type d'analyse permettant d'estimer la tenue en fatigue d'un matériau sur la base de quelques essais pourrait aider à accélérer la phase de développement de nouveaux matériaux ou la recherche d'une microstructure optimisée.



## Annexe A

# Géométrie des éprouvettes utilisées pour la réalisation des essais et étude du mouchetis pour la réalisation des essais *in situ* MEB

### A.1 Plans d'éprouvette

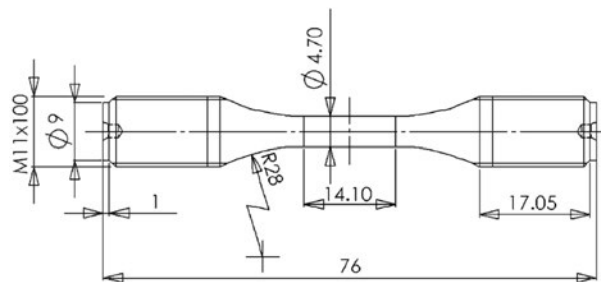


FIGURE A.1 – Géométrie des éprouvettes utilisée pour les essais mécaniques standards.

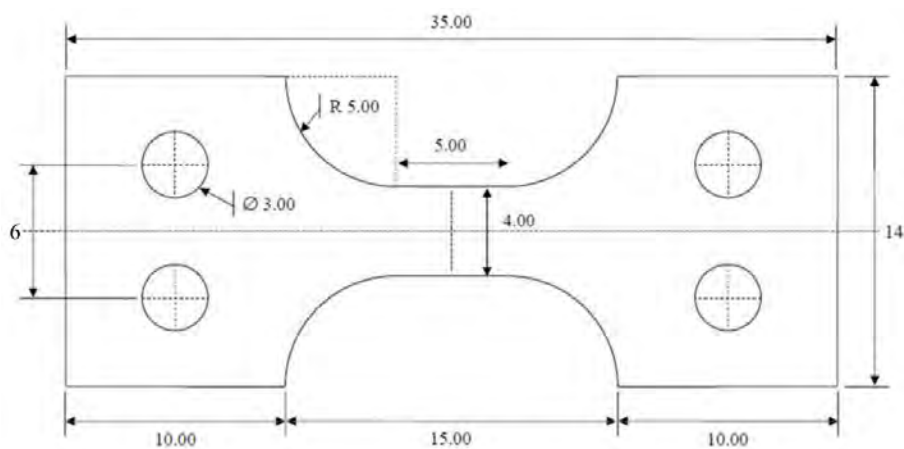


FIGURE A.2 – Géométrie des éprouvettes micromécaniques. L'épaisseur est de 1 mm.

## A.2 Étude du mouchetis

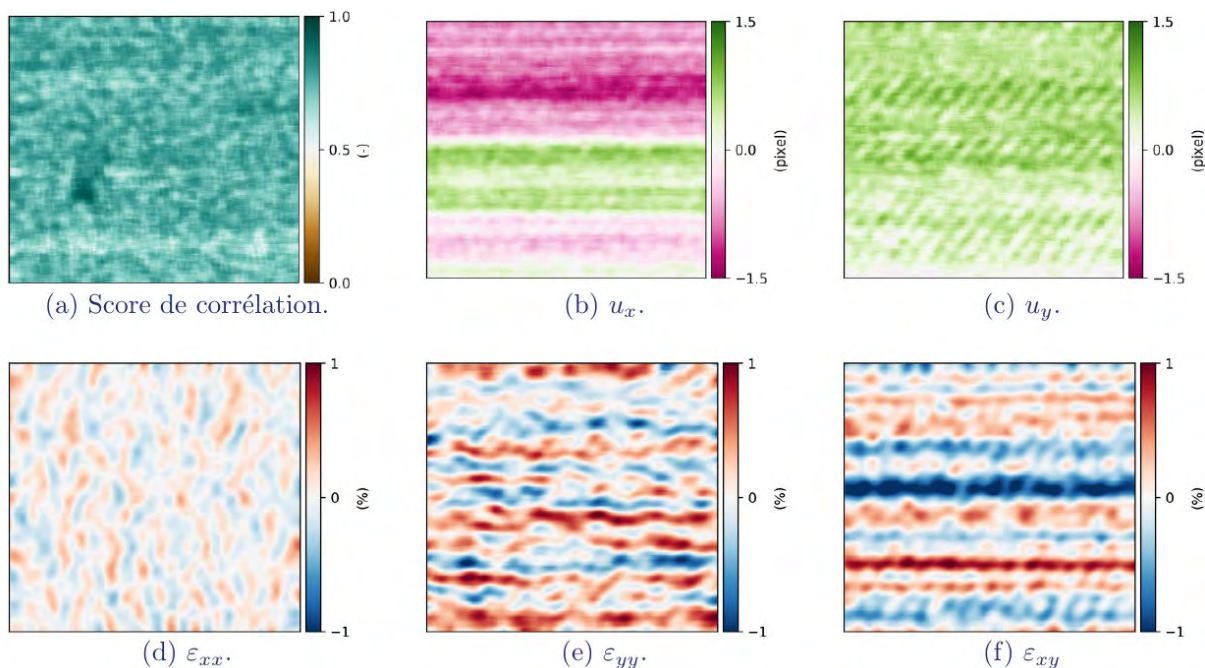


FIGURE A.3 – Cartes issues de la corrélation d’images pour l’étude du mouchetis or réalisées sur les images d’une même zone acquises successivement. Le champ observé est de  $6,35 \mu\text{m} \times 6,35 \mu\text{m}$  avec  $1 \text{ pixel} \approx 9 \text{ nm}$ .

On souhaite quantifier l’erreur de mesure introduite lors d’une acquisition d’images au MEB pour s’assurer d’être capable de distinguer ce bruit de mesure d’une déformation du matériau.

Pour ce faire, deux images d’une même zone de  $6,35 \mu\text{m} \times 6,35 \mu\text{m}$  avec  $1 \text{ pixel} \approx 9 \text{ nm}$  sont acquises successivement et une corrélation d’images numérique est réalisée. La taille moyenne des particules du mouchetis étant d’environ  $30 \text{ nm}$ , sur l’image 1 particule est formée en moyenne par 3 pixel. La taille de la boîte de corrélation est alors choisie telle que  $T_B = 25 \text{ px}$ , ce qui permet de s’assurer qu’au moins 3 particules soient repérées dans chaque boîte. La résolution pour la déformation est donc de  $T_\varepsilon = 2T_B + 1 = 51 \text{ pixel} \approx 459 \text{ nm}$ . Dans un cas parfait, les déplacements et les déformations mesurés seraient nul.

Les résultats de cette corrélation sont présentés en Figure A.3. La carte du score de corrélation (Figure A.3.(a)) donne un indice de confiance sur les résultats obtenus, 1 étant un score parfait. Le score de corrélation reste supérieur à 0,5 mais est assez bruité. Les cartes des déplacements selon l’abscisse et l’ordonnée des images, respectivement  $u_x$  et  $u_y$ , sont présentées en Figure A.3.(b) et Figure A.3.(c). Des déplacements de l’ordre du pixel sont mesurés. Des lignes distinctes apparaissent, preuves qu’il s’agit d’un bruit généré par le balayage du faisceau d’électrons. Ce bruit se retrouve sur les cartes des déformations  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$  et  $\varepsilon_{xy}$ .

Les déformations liées aux instabilités de balayage sont inférieures à 1 %. On peut déduire de ces résultats que seules des déformations locales supérieures à 1 % peuvent être discutées avec le mouchetis utilisé.

L’objectif principal de l’essai à réaliser sur la microstructure presque- $\gamma$  est de vérifier si de la déformation plastique est observée dans la microstructure avant la transition élasto-plastique macroscopique (i.e. avant la bosse). Si les corrélations sont réalisées à effort nul, alors la déformation mesurée sera uniquement de la déformation plastique. On souhaite donc s’assurer que des corrélations d’images peuvent être réalisées après un retour à effort nul. Pour cela, un essai

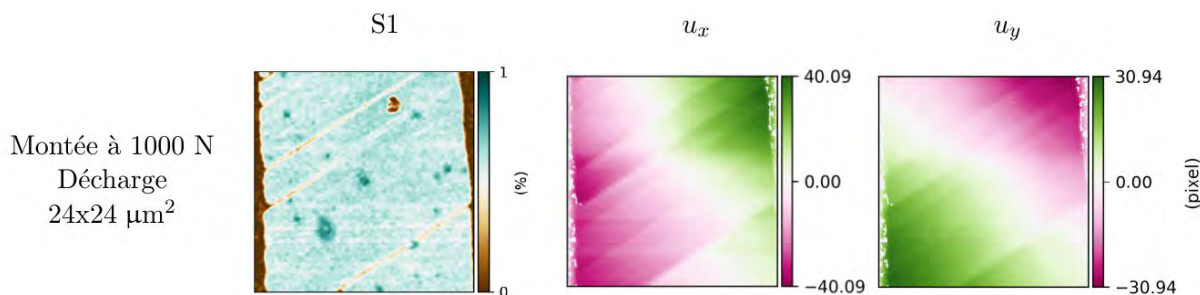


FIGURE A.4 – Cartes des scores de corrélation et des déplacements issues des corrélations d’images.

*in situ* est réalisé sur une éprouvette préliminaire avec une microstructure totalement-lamellaire.

Un effort de 1000 N est appliqué à l’éprouvette. Les cartes des scores de corrélation et des champs de déplacement sont présentées en Figure A.4. Le score de corrélation est supérieur à 50 % sauf dans les zones où des bandes de glissement persistantes sont observées. Ces bandes sont aussi observées sur les cartes des déplacements. Les champs mesurés sont de l’ordre du nanomètre.

Les cartographies des déformations associées à ces champs de déplacement sont présentées en Figure A.5. Les niveaux de déformation se situent en dehors du bruit de mesure.

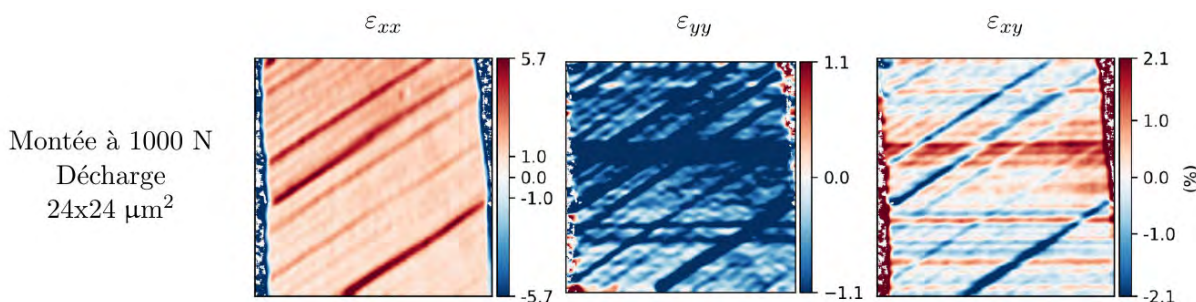


FIGURE A.5 – Cartes des déformations calculées à partir des résultats des corrélations des corrélations d’images.

En conclusion de cette mise en place d’essais mécaniques *in situ* MEB, des champs de déplacement de l’ordre du nanomètre sont mesurés. Ces champs permettent de calculer des bandes de déformation de 300 nm d’épaisseur. Cette résolution est donc adaptée à l’étude de la déformation dans la microstructure presque- $\gamma$  qui contient des grains de diamètre équivalent inférieur à 10  $\mu\text{m}$ . Enfin, l’acquisition d’images lors du retour à effort nul permet d’étudier uniquement la localisation de la déformation plastique. On peut ainsi vérifier si dans la microstructure presque- $\gamma$ , de la déformation a lieu avant la transition élasto-plastique macroscopique.



## Annexe B

# Génération des microstructures statistiquement représentatives avec Neper

### Microstructure presque- $\gamma$

La microstructure presque- $\gamma$  est complexe car tri-phasée : on observe des grains  $\gamma$  (95 %),  $\alpha_2$  (2,5 %) et  $\beta_0$  (2,5 %). Les caractéristiques microstructurales sont indiquées dans le tableau Tableau B.1. Le résultat de la génération est présenté en Figure B.1 et sont reproductibles via la commande :

```
$ neper -T -n 150 -dim 2 -id 1 -morpho "diameq :0.6*lognormal(1,0.8017) + 0.2*lognormal(0.332,0.146) + 0.2*lognormal(0.28722,0.096462),1-sphericity :lognormal(0.145,0.03)"
```

Phase	Fraction surfacique	$\langle D_{eq} \rangle$	$\sigma_{D_{eq}}$
$\gamma$	95	5,54	4,44
$\alpha_2$	2.5	1,82	0,81
$\beta$	2.5	1,59	0,53
<i>Mixte</i>	100	3,92	3,90

TABLEAU B.1 – Résultats de la caractérisation microstructurale de la microstructure presque- $\gamma$ . *Mixte* indique toutes les phases mélangées.

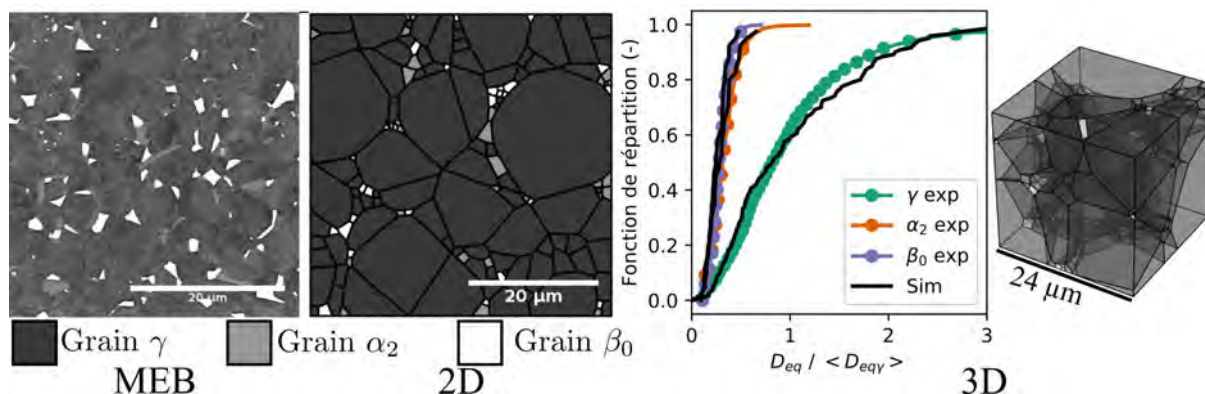


FIGURE B.1 – Génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives de la microstructure presque- $\gamma$ .



### Microstructure duplex

La microstructure duplex est biphasée et contient dans des proportions proches des grains  $\gamma$  et des colonies lamellaires dont les tailles sont proches. Les résultats de la caractérisation expérimentale réalisée manuellement à partir d'images MEB sont donnés dans le [Tableau B.2](#). Les résultats de la génération sont présentés en [Figure B.2](#) et sont reproductibles avec la commande :

\$ neper -T -n 150 -dim 3 -id 1 -morpho "diameq :0.5\*lognormal(1,0.2526) +0.5\*lognormal(1.3362,0.366) ,1-sphericity :lognormal(0.145,0.03)"

Phase	Fraction surfacique	$\langle D_{eq} \rangle$	$\sigma_{D_{eq}}$
$\gamma$	0,35	7,14	1,80
Lamellaire	0,65	9,55	2,62

TABLEAU B.2 – Résultats de la caractérisation des lois normales pour la microstructure duplex.

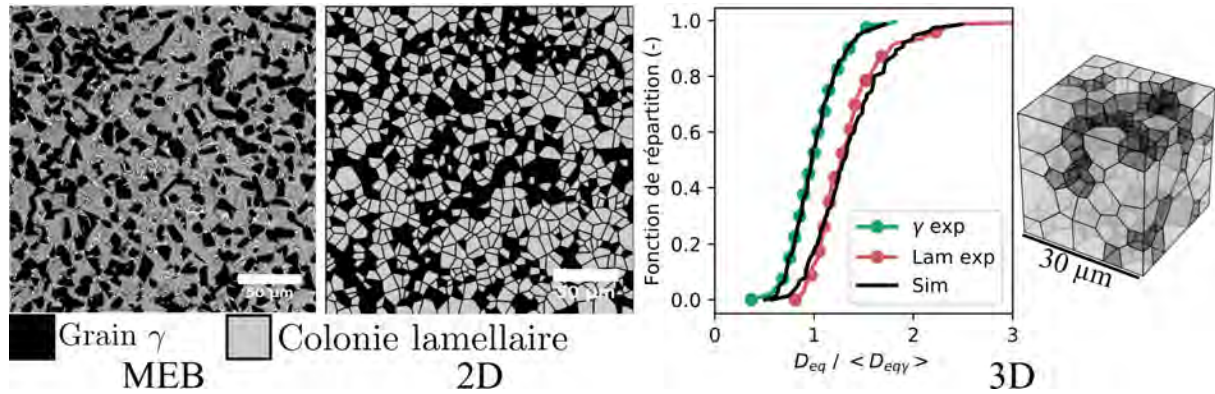


FIGURE B.2 – Génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives de la microstructure duplex.

### Microstructure presque-lamellaire

La microstructure presque-lamellaire est composée majoritairement de colonies lamellaires (90 %), mais contient une proportion non négligeable de grains  $\gamma$  (10 %). Les résultats de la caractérisation microstructurale sont donnés dans le [Tableau B.3](#). Les résultats de la génération sont présentés en [Figure B.3](#) et sont reproductibles avec la commande :

\$ neper -T -n 150 -dim 3 -id 1 -morpho "diameq :0.30\*lognormal(1,0.26) +0.70\*lognormal(2.04,0.72),1-sphericity :lognormal(0.145,0.03)"

Phase	Fraction surfacique	$\langle D_{eq} \rangle$ ( $\mu\text{m}$ )	$\sigma_{D_{eq}}$ (-)
$\gamma$	0,1	6,27	1,83
Cluster $\gamma$	0,1	30	7,8
Lamellaire	0,9	60,7	21,46

TABLEAU B.3 – Résultat de la caractérisation des lois normales pour la microstructure presque-lamellaire. La ligne "Cluster  $\gamma$ " correspond à la mesure de la taille des grains  $\gamma$  par cluster (voir [Figure 4.13](#)).

### Microstructure totalement-lamellaire

La microstructure lamellaire est monophasée et donc simple à générer. Les résultats de la

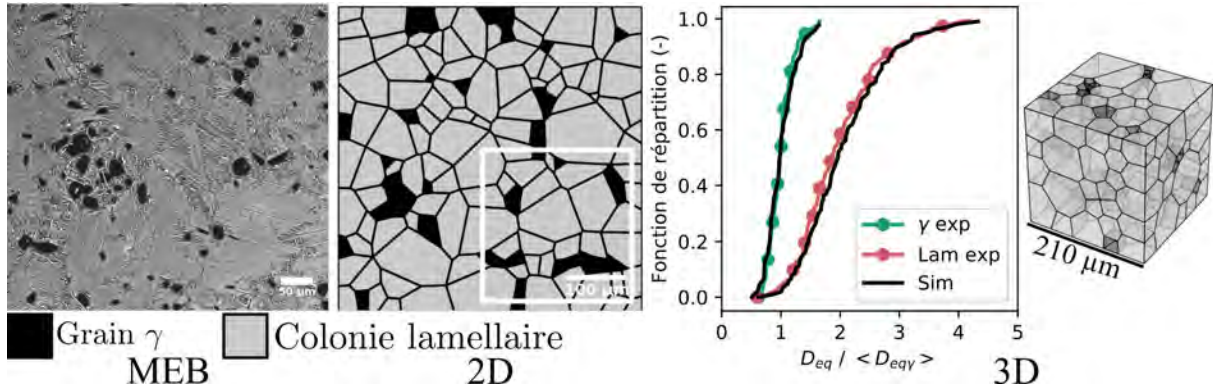


FIGURE B.3 – Génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives de la microstructure presque-lamellaire.

caractérisation sont donnés dans le Tableau B.4. Les résultats sont présentés en Figure B.4 et sont reproductibles sur Neper via la commande :

\$ neper -T -n 150 -dim 3 -id 1 -morpho "diameq :log normal(1,0.36),1-sphericity :lognormal(0.145,0.03)"

Phase	Fraction surfacique	$\langle D_{eq} \rangle$	$\sigma_{D_{eq}}$
Lamellaire	1	201	73

TABLEAU B.4 – Résultat de la caractérisation des lois normales pour la microstructure totalement-lamellaire.

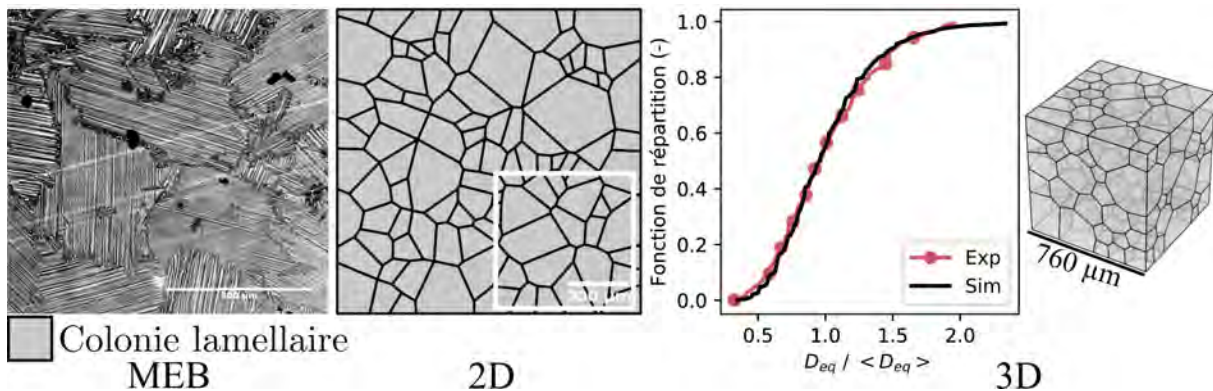


FIGURE B.4 – Génération de microstructures virtuelles statistiquement représentatives de la microstructure totalement lamellaire.



## Annexe C

# Complément de l'analyse des Indicateurs de Tenue en Fatigue

Les courbes qui n'ont pas pu être montrées dans le chapitre 5 sont présentées ici. Il est conseillé de lire le chapitre pour pouvoir interpréter les graphiques.

### Microstructure totalement-lamellaire

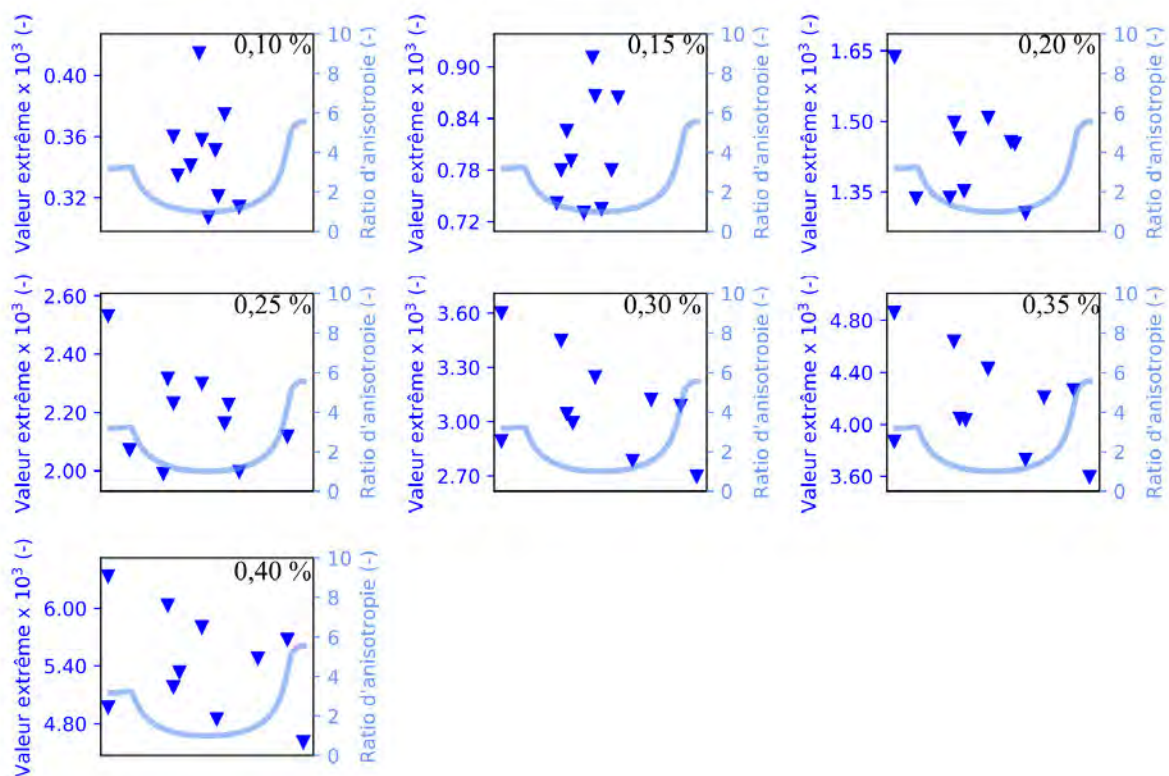


FIGURE C.1 – Analyse des ITF pour la microstructure totalement-lamellaire à 20 °C.

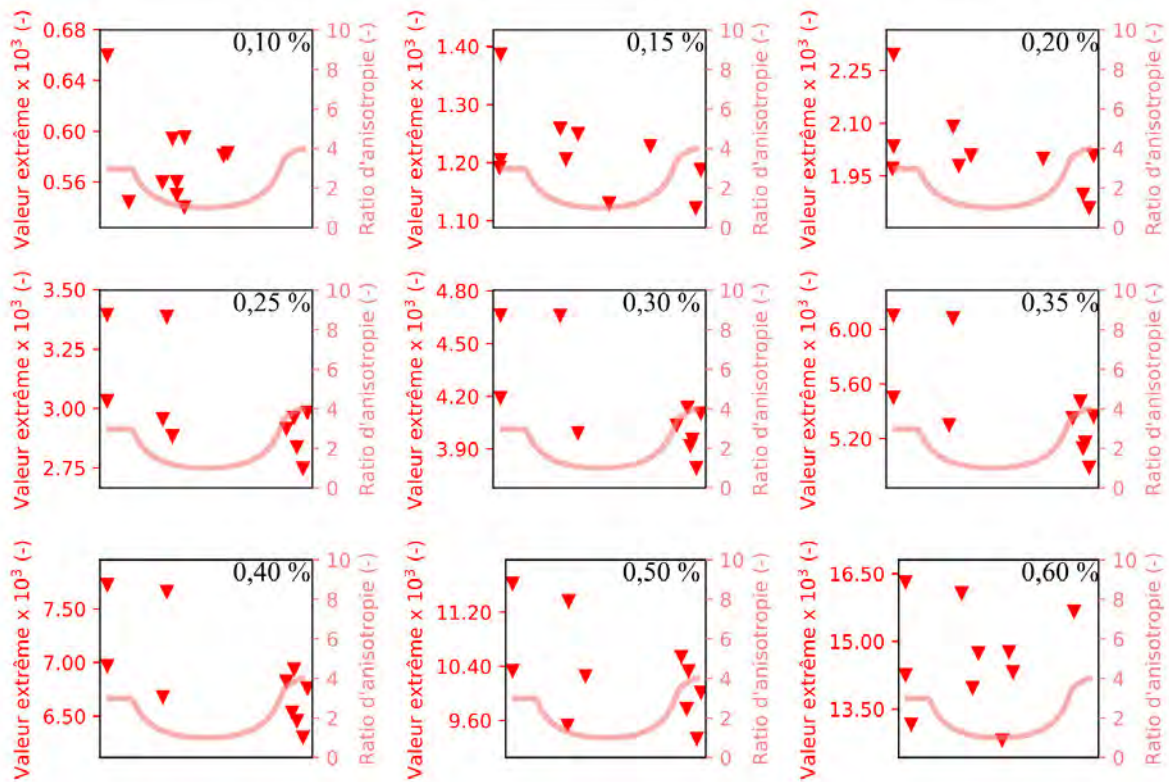


FIGURE C.2 – Analyse des ITF pour la microstructure totalement-lamellaire à 750 °C.

### Microstructure presque- $\gamma$

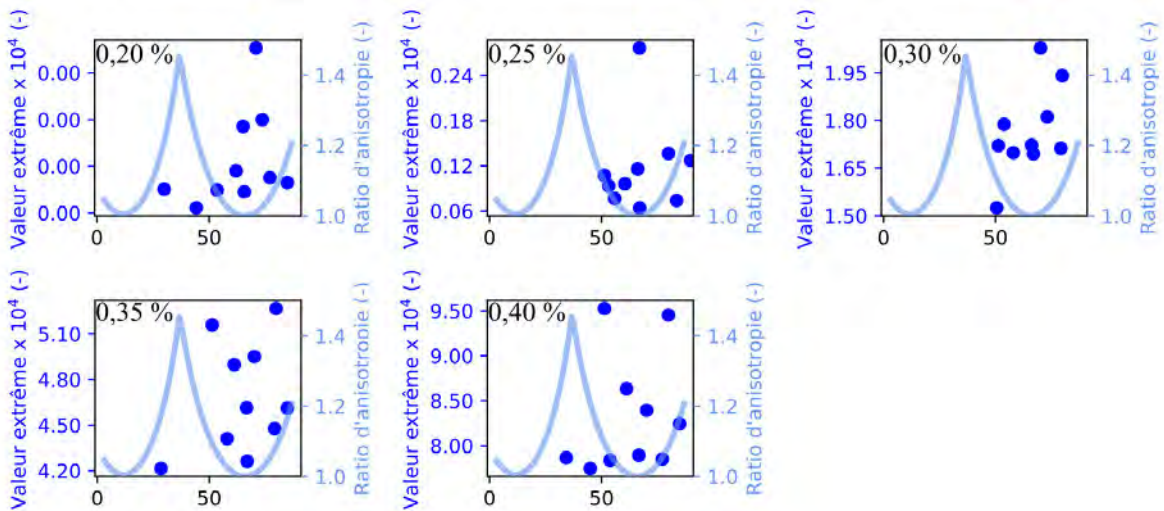


FIGURE C.3 – Analyse des ITF pour la microstructure presque- $\gamma$  à 20 °C.

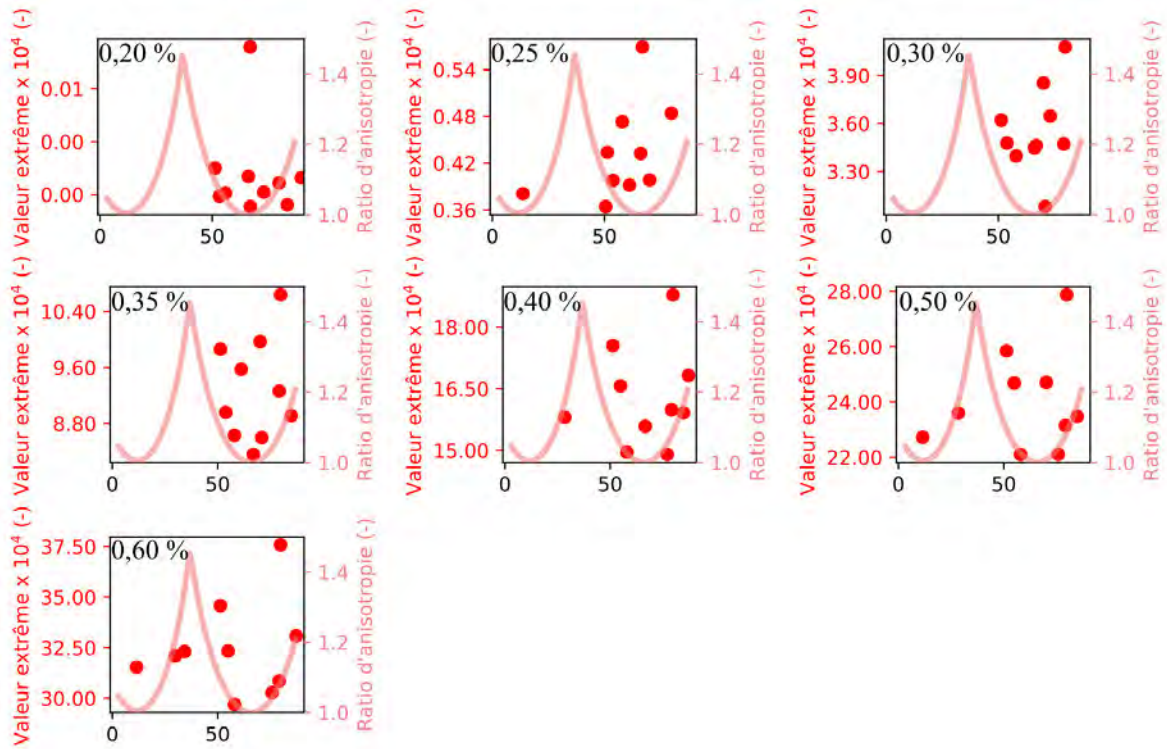


FIGURE C.4 – Analyse des ITF pour la microstructure presque- $\gamma$  à 750 °C.

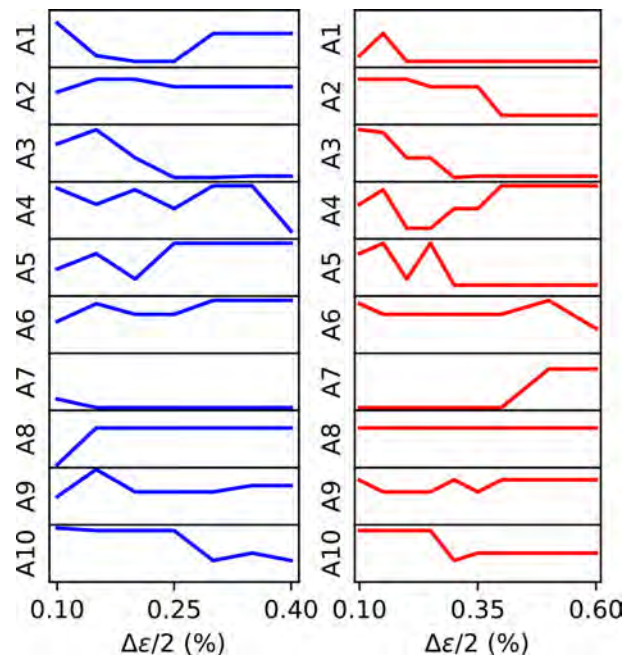


FIGURE C.5 – Analyse des grains critiques pour la microstructure presque- $\gamma$ .

## Microstructure presque-lamellaire

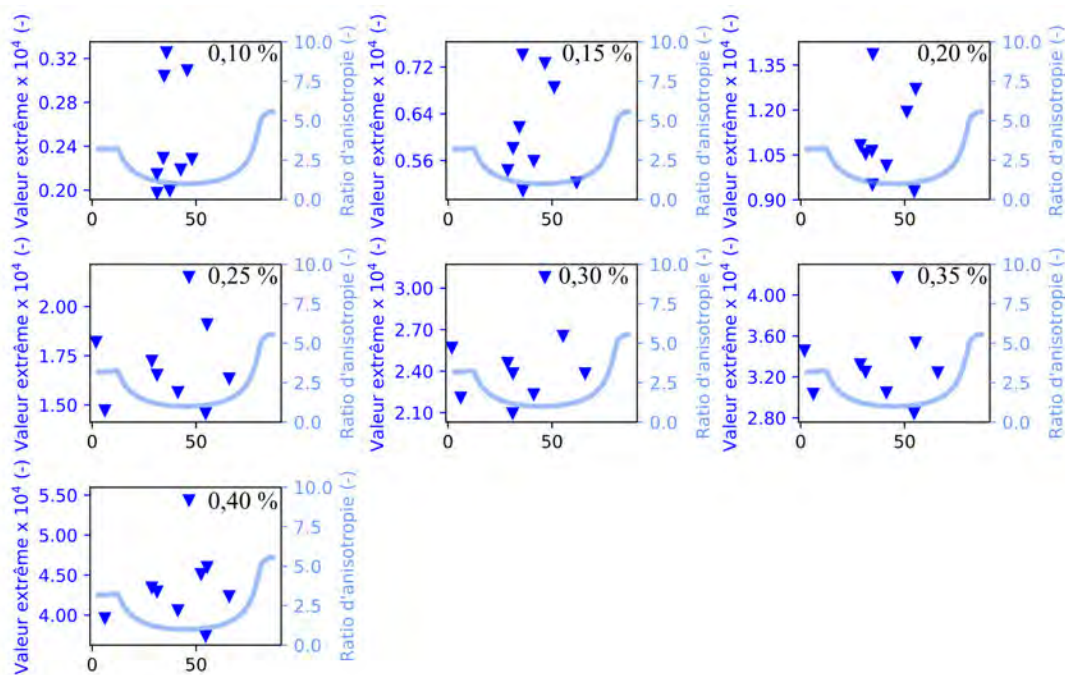


FIGURE C.6 – Analyse des ITF dans la microstructure presque-lamellaire à 20 °C : colonies lamellaires.

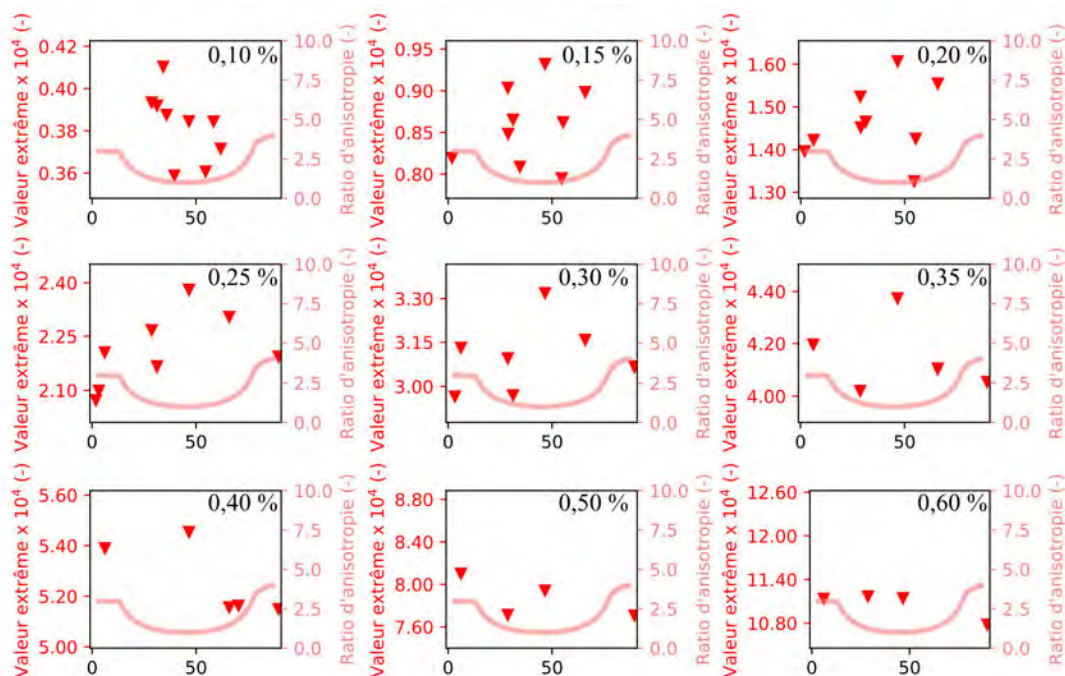


FIGURE C.7 – Analyse des ITF dans la microstructure presque-lamellaire à 750 °C : colonies lamellaires.

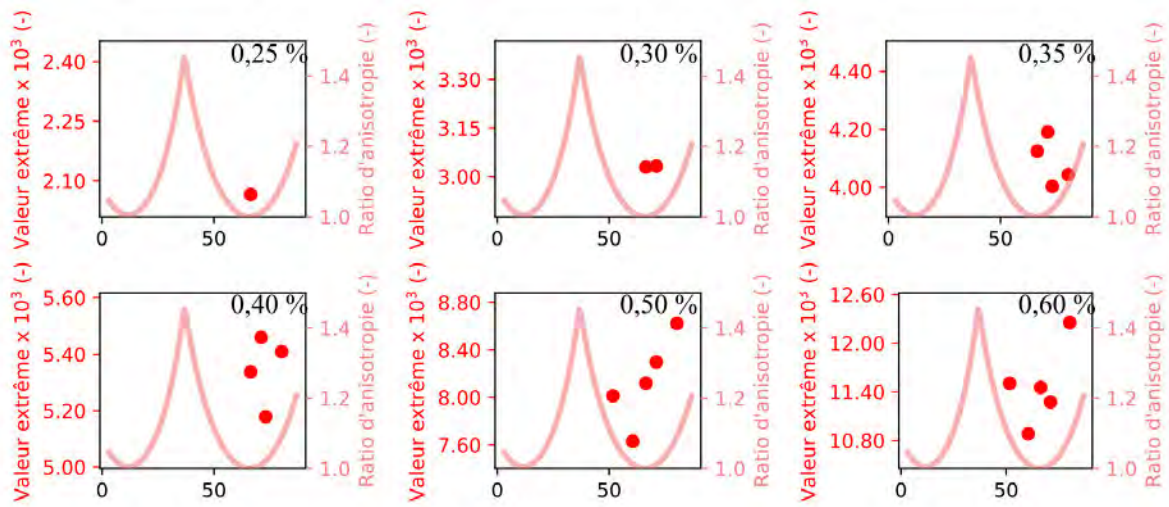


FIGURE C.8 – Analyse des ITF pour la microstructure presque-lamellaire.

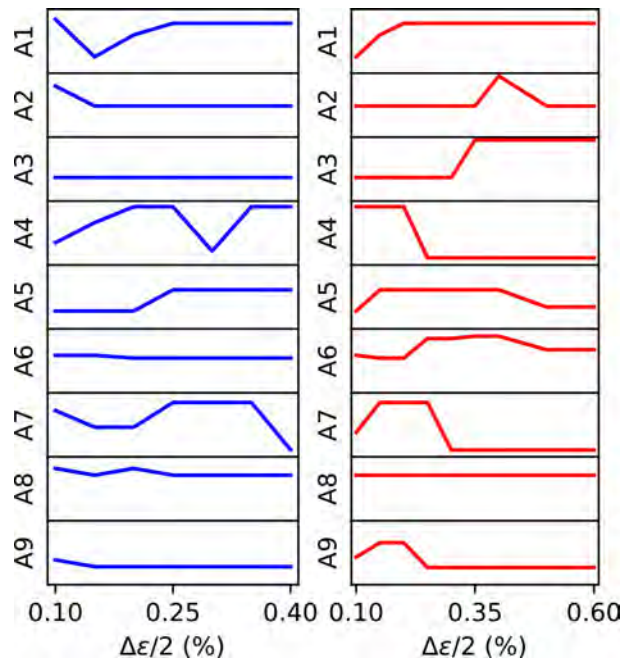


FIGURE C.9 – Analyse des grains critiques pour la microstructure presque-lamellaire.



## Microstructure duplex

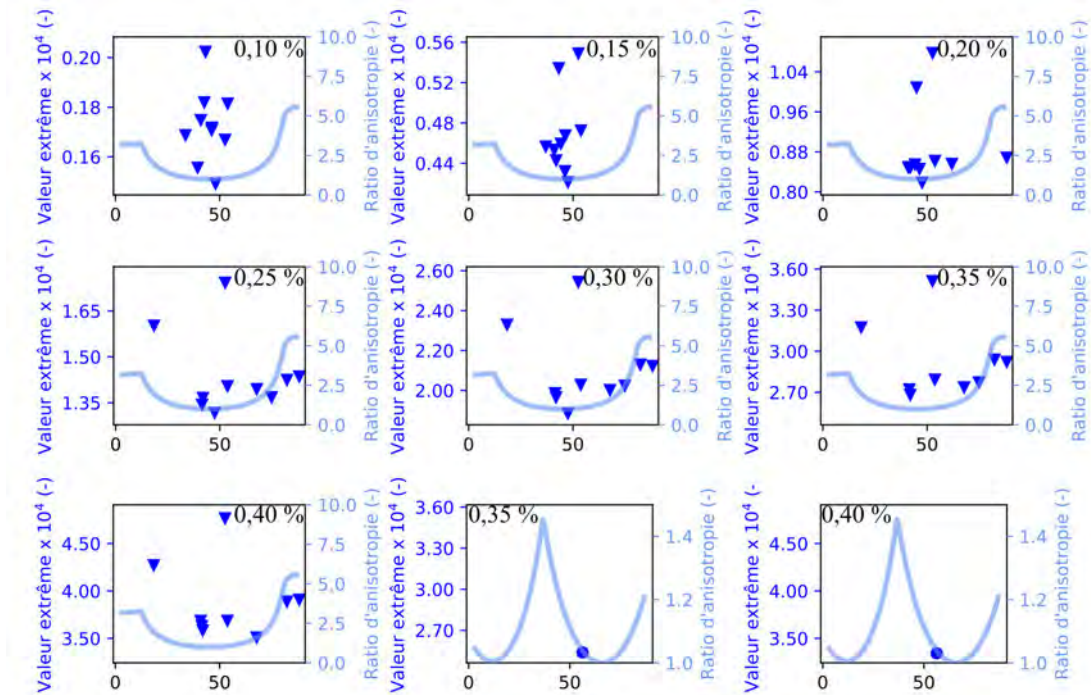


FIGURE C.10 – Analyse des ITF pour la microstructure duplex à 20 °C.

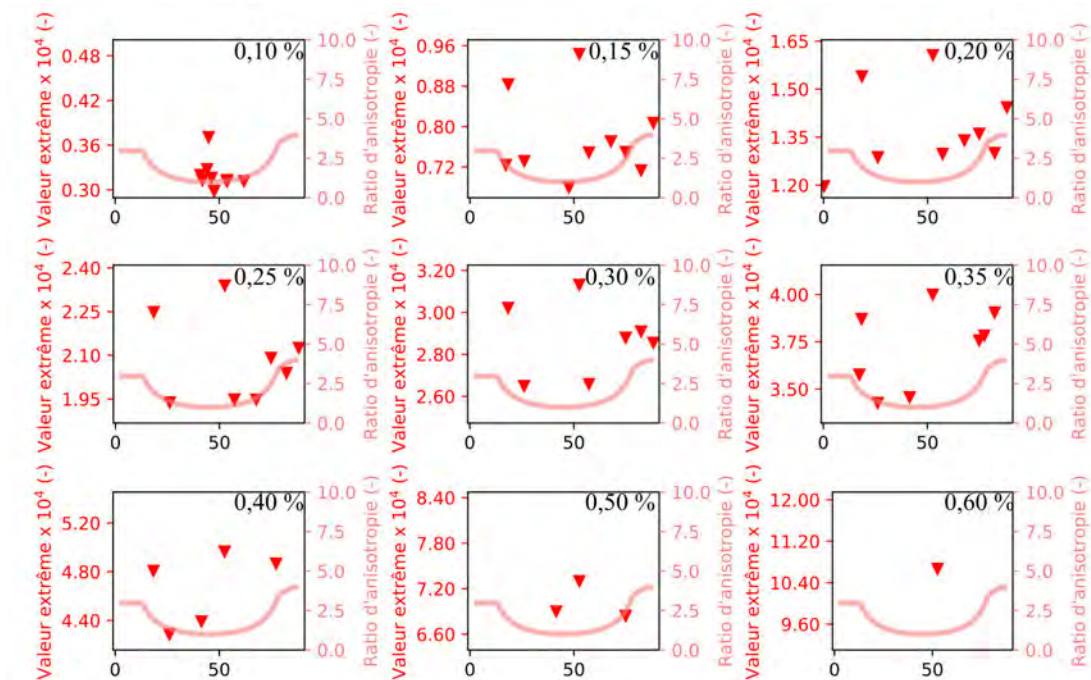


FIGURE C.11 – Analyse des ITF pour les colonies lamellaires de la microstructure duplex à 750 °C.

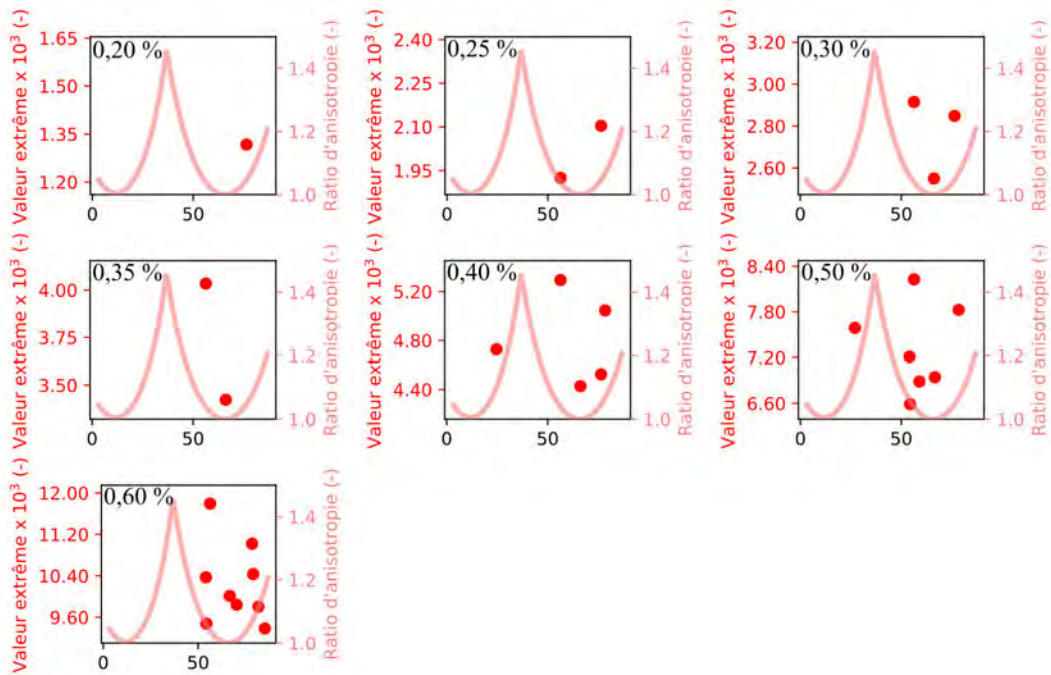


FIGURE C.12 – Analyse des ITF pour les grains  $\gamma$  de la microstructure duplex à 750 °C.

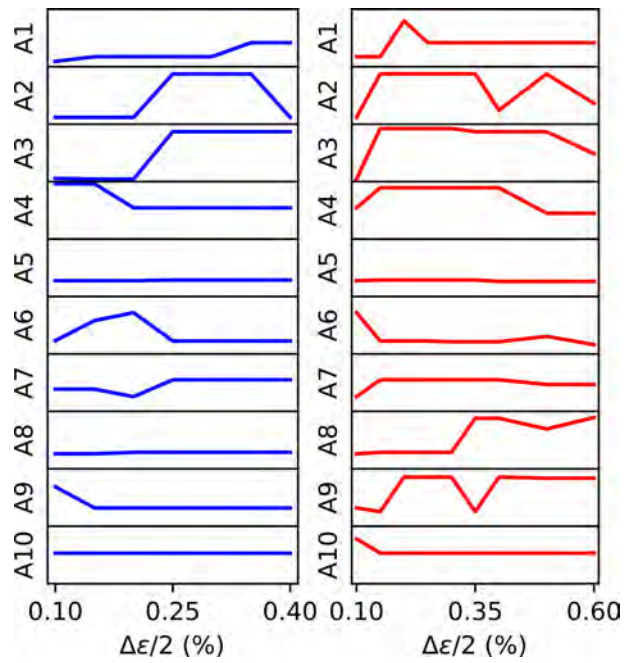


FIGURE C.13 – Analyse des grains critiques pour la microstructure duplex.

## Analyse des diamètres

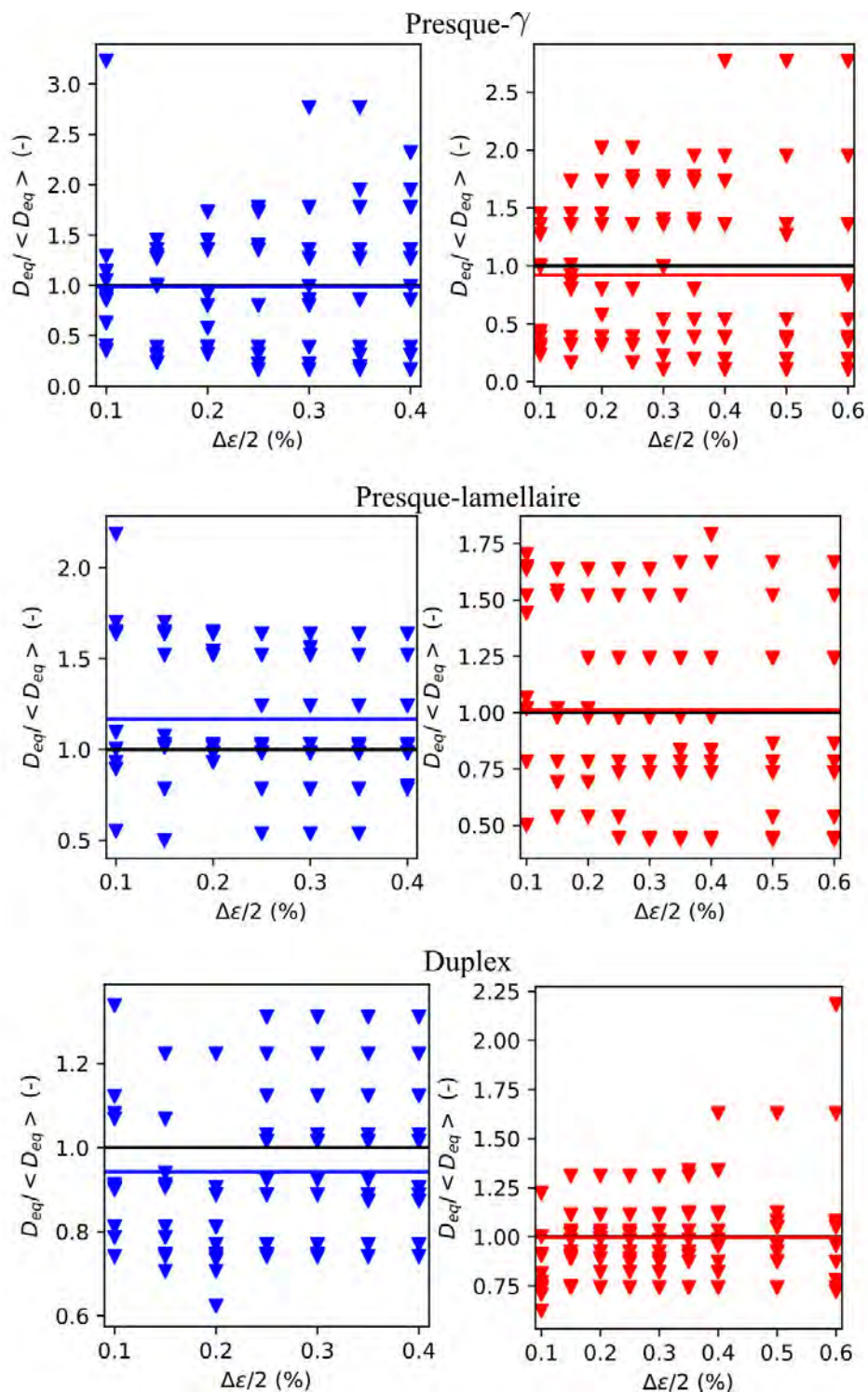


FIGURE C.14 – Analyse du diamètre équivalent des grains critiques pour trois microstructures.

## Annexe D

# Eprouvette pour l'analyse des phénomènes d'intrusion-extrusion

Une éprouvette adaptée à l'étude des phénomènes d'intrusion-extrusion a été conçue sur Abaqus. Il s'agit d'une éprouvette de fatigue cylindrique standard, sur laquelle une face plane dans la zone utile est usinée. La profondeur de la face a été optimisée afin d'éviter qu'elle ne génère des concentrations de contrainte. Un lot de six éprouvettes en alliage IRIS a été usiné à partir de disques issus de compaction SPS.

La face plane peut être polie afin de caractériser la microstructure sous-jacente au MEB. Plusieurs types d'expériences peuvent alors être réalisés sur une machine d'essai standard, ce qui permet d'appliquer des chargements complexes.

La première expérience consiste à réaliser des essais interrompus afin de mesurer l'évolution de la topologie en surface (rugosité) et de la densité de microfissures en fonction du nombre de cycles. L'essai étant interrompu, l'expérience peut aussi être réalisée à haute température sur plusieurs jours. Plusieurs amplitudes de déformation doivent être étudiées afin de vérifier si les fissures apparaissent plutôt dans des colonies lamellaires en mode mou ou en mode dur.

La deuxième expérience consisterait à appliquer le même type de mouchetis peinture que celui utilisé pour les essais micromécaniques. Des essais cycliques alternés voire de fatigue avec suivi de la déformation en surface par corrélation d'images pourraient alors être réalisés.

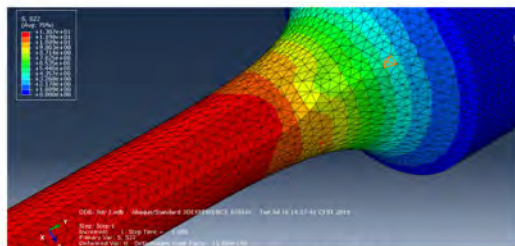
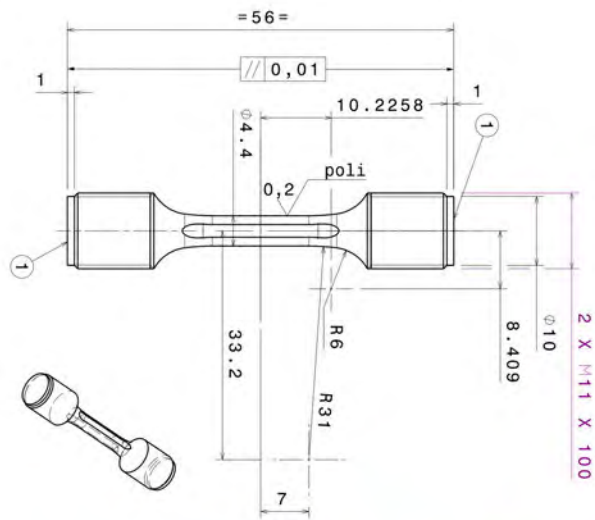


FIGURE D.1 – Géométrie des éprouvettes d'intrusion-extrusion.

# Bibliographie

- [Appel et al., 2016] Appel, F., Clemens, H., and Fischer, F. (2016). Modeling concepts for intermetallic titanium aluminides. *Progress in Materials Science*, 81 :55–124.
- [Appel et al., 2010] Appel, F., Heckel, T. K., and Christ, H.-J. (2010). Electron microscope characterization of low cycle fatigue in a high-strength multiphase titanium aluminide alloy. *International journal of fatigue*, 32(5) :792–798.
- [Appel et al., 2011] Appel, F., Paul, J. D. H., and Oehring, M. (2011). *Gamma titanium aluminide alloys : science and technology*. John Wiley & Sons.
- [Appel and Wagner, 1998] Appel, F. and Wagner, R. (1998). Microstructure and deformation of two-phase  $\gamma$ -titanium aluminides. *Materials science and engineering : r : reports*, 22(5) :187–268.
- [Bandyopadhyay and Sangid, 2019] Bandyopadhyay, R. and Sangid, M. D. (2019). Crystal plasticity assessment of inclusion-and matrix-driven competing failure modes in a nickel-base superalloy. *Acta Materialia*, 177 :20–34.
- [Bari and Hassan, 2000] Bari, S. and Hassan, T. (2000). Anatomy of coupled constitutive models for ratcheting simulation. *International Journal of Plasticity*, 16(3-4) :381–409.
- [Basseville et al., 2017] Basseville, S., Cailletaud, G., Ghidossi, T., Guilhem, Y., Lacoste, E., Proudhon, H., Signor, L., and Villechaise, P. (2017). Numerical analysis on the local mechanical fields in polycrystalline 316LN stainless steel under cyclic fatigue loading : Comparison with experimental results. *Materials Science and Engineering : A*, 696 :122–136.
- [Bauer and Christ, 2009] Bauer, V. and Christ, H.-J. (2009). Thermomechanical fatigue behaviour of a third generation  $\gamma$ -TiAl intermetallic alloy. *Intermetallics*, 17(5) :370–377.
- [Bauschinger, 1886] Bauschinger, J. (1886). On the change of position of the elastic limit of iron and steel under cyclic variations of stress. *Mitt. Mech.-Tech. Lab., Munich*, 13(1).
- [Beran et al., 2016] Beran, P., Heczko, M., Kruml, T., Panzner, T., and van Petegem, S. (2016). Complex investigation of deformation twinning in  $\gamma$ -TiAl by TEM and neutron diffraction. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 95 :647–662.
- [Beretta et al., 2014] Beretta, S., Filippini, M., Patriarca, L., and Sabbadini, S. (2014). Analysis of fatigue damage accumulation in TiAl intermetallics. In *Key engineering materials*, volume 592, pages 30–35. Trans Tech Publ.
- [Berteaux, 2005] Berteaux, O. (2005). *Etude des mécanismes d'écroutissage et d'endommagement cycliques des alliages TiAl élaborés par métallurgie des poudres*. PhD thesis, Poitiers.
- [Berteaux et al., 2006] Berteaux, O., Jouiad, M., Thomas, M., and Hénaff, G. (2006). Microstructure–low cycle fatigue behaviour relationships in a PM  $\gamma$ -TiAl alloy. *Intermetallics*, 14(10-11) :1130–1135.
- [Bertin et al., 2016] Bertin, M., Du, C., Hoefnagels, J. P., and Hild, F. (2016). Crystal plasticity parameter identification with 3D measurements and integrated digital image correlation. *Acta Materialia*, 116 :321–331.

- [Beschliesser et al., 2002] Beschliesser, M., Chatterjee, A., Lorich, A., Knabl, W., Kestler, H., Dehm, G., and Clemens, H. (2002). Designed fully lamellar microstructures in a  $\gamma$ -TiAl based alloy : adjustment and microstructural changes upon long-term isothermal exposure at 700 and 800°C. *Materials Science and Engineering : A*, 329 :124–129.
- [Bewlay et al., 2016] Bewlay, B., Nag, S., Suzuki, A., and Weimer, M. (2016). TiAl alloys in commercial aircraft engines. *Materials at High Temperatures*, 33(4-5) :549–559.
- [Bewlay et al., 2013] Bewlay, B., Weimer, M., Kelly, T., Suzuki, A., and Subramanian, P. (2013). The science, technology, and implementation of TiAl alloys in commercial aircraft engines. *MRS Online Proceedings Library Archive*, 1516 :49–58.
- [Bieler et al., 2009] Bieler, T., Eisenlohr, P., Roters, F., Kumar, D., Mason, D., Crimp, M., and Raabe, D. (2009). The role of heterogeneous deformation on damage nucleation at grain boundaries in single phase metals. *International Journal of Plasticity*, 25(9) :1655–1683.
- [Blackburn et al., 1970] Blackburn, M., Jaffee, R., and Promisel, N. (1970). The science, technology and application of titanium. *Pergamon, Oxford, 1970) p*, 633.
- [Botten et al., 2001] Botten, R., Wu, X., Hu, D., and Loretto, M. (2001). The significance of acoustic emission during stressing of TiAl-based alloys. part I : Detection of cracking during loading up in tension. *Acta materialia*, 49(10) :1687–1691.
- [Bourne, 2017] Bourne, N. K. (2017). Materials science : Atomistic views of deformation. *Nature*, 550(7677) :461–463.
- [Bridier et al., 2009] Bridier, F., McDowell, D. L., Villechaise, P., and Mendez, J. (2009). Crystal plasticity modeling of slip activity in Ti-6Al-4V under high cycle fatigue loading. *International Journal of Plasticity*, 25(6) :1066–1082.
- [Brockman, 2003] Brockman, R. A. (2003). Analysis of elastic-plastic deformation in TiAl polycrystals. *International journal of plasticity*, 19(10) :1749–1772.
- [Brown and Stobbs, 1976] Brown, L. and Stobbs, W. (1976). The work-hardening of copper-silica v. equilibrium plastic relaxation by secondary dislocations. *Philosophical Magazine*, 34(3) :351–372.
- [Butzke and Bargmann, 2015] Butzke, J. and Bargmann, S. (2015). Thermomechanical modeling of polysynthetically twinned TiAl crystals. *Philosophical Magazine*, 95(24) :2607–2626.
- [Caillard and Couret, 2009] Caillard, D. and Couret, A. (2009). The Hall–Petch law investigated by means of in situ straining experiments in lamellar TiAl and deformed Al. *Microscopy research and technique*, 72(3) :261–269.
- [Cailletaud, 1992] Cailletaud, G. (1992). A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals. *International Journal of Plasticity*, 8(1) :55–73.
- [Cailletaud et al., 2003] Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, V., and Quilici, S. (2003). Some elements of microstructural mechanics. *Computational Materials Science*, 27(3) :351–374.
- [Castelluccio and McDowell, 2014] Castelluccio, G. M. and McDowell, D. L. (2014). Mesoscale modeling of microstructurally small fatigue cracks in metallic polycrystals. *Materials Science and Engineering : A*, 598 :34–55.
- [Castelluccio and McDowell, 2015] Castelluccio, G. M. and McDowell, D. L. (2015). Microstructure and mesh sensitivities of mesoscale surrogate driving force measures for transgranular fatigue cracks in polycrystals. *Materials Science and Engineering : A*, 639 :626–639.
- [Castelluccio et al., 2016] Castelluccio, G. M., Musinski, W. D., and McDowell, D. L. (2016). Computational micromechanics of fatigue of microstructures in the HCF-VHCF regimes. *International Journal of Fatigue*, 93 :387–396.

- [Chan and Kim, 1992] Chan, K. and Kim, Y.-W. (1992). Influence of microstructure on crack-tip micromechanics and fracture behaviors of a two-phase TiAl alloy. *Metallurgical Transactions A*, 23(6) :1663–1677.
- [Chan, 2010] Chan, K. S. (2010). Roles of microstructure in fatigue crack initiation. *International Journal of Fatigue*, 32(9) :1428–1447.
- [Chawla and Deng, 2005] Chawla, N. and Deng, X. (2005). Microstructure and mechanical behavior of porous sintered steels. *Materials Science and Engineering : A*, 390(1-2) :98–112.
- [Chen et al., 2018] Chen, B., Jiang, J., and Dunne, F. P. (2018). Is stored energy density the primary meso-scale mechanistic driver for fatigue crack nucleation? *International Journal of Plasticity*, 101 :213–229.
- [Chen et al., 1999] Chen, G., Zhang, W., Liu, Z., Li, S., Kim, Y., Dimiduk, D., and Loretto, M. (1999). Gamma titanium aluminides. *TMS, Warrendale, PA*, pages 371–380.
- [Chiaruttini et al., 2013] Chiaruttini, V., Riolo, V., and Feyel, F. (2013). Advanced remeshing techniques for complex 3D crack propagation. *Icf13*, pages 547–555.
- [Choteau, 1999] Choteau, M. (1999). *Caractérisation de l'effet Bauschinger en sollicitations uniaxiales d'un acier inoxydable austénique*. PhD thesis, Lille 1.
- [Christ et al., 2001] Christ, H.-J., Fischer, F., and Maier, H. (2001). High-temperature fatigue behavior of a near- $\gamma$  titanium aluminide alloy under isothermal and thermo-mechanical conditions. *Materials Science and Engineering : A*, 319 :625–630.
- [Christian and Mahajan, 1995] Christian, J. W. and Mahajan, S. (1995). Deformation twinning. *Progress in materials science*, 39(1-2) :1–157.
- [Clark et al., 2019] Clark, B. C., Castelluccio, G. M., Reiterer, M., McDowell, D., and Neu, R. (2019). Microstructure-sensitive fatigue modelling of medical-grade fine wire. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 42(1) :152–165.
- [Clemens and Mayer, 2013] Clemens, H. and Mayer, S. (2013). Design, processing, microstructure, properties, and applications of advanced intermetallic TiAl alloys. *Advanced Engineering Materials*, 15(4) :191–215.
- [Clemens and Smarsly, 2011] Clemens, H. and Smarsly, W. (2011). Light-weight intermetallic titanium aluminides—status of research and development. In *Advanced materials research*, volume 278, pages 551–556. Trans Tech Publ.
- [Corneec et al., 2015] Corneec, A., Kabir, M. R., and Huber, N. (2015). Numerical prediction of the stress–strain response of a lamellar  $\gamma$ TiAl polycrystal using a two-scale modelling approach. *Materials Science and Engineering : A*, 620 :273–285.
- [Cottrell and Dexter, 1954] Cottrell, A. H. and Dexter, D. (1954). Dislocations and plastic flow in crystals. *American journal of physics*, 22 :242–243.
- [Coudon, 2017] Coudon, F. (2017). *Comportement mécanique du superalliage base nickel à solidification dirigée DS200+ Hf*. PhD thesis.
- [Coudon et al., 2020] Coudon, F., Gourdin, S., Boucicaud, A., Rose, T., and Cailletaud, G. (2020). A stochastic approach applied to directionally solidified turbine blades. *International Journal of Solids and Structures*, 184 :193–201.
- [Couret et al., 2008] Couret, A., Molénat, G., Galy, J., and Thomas, M. (2008). Microstructures and mechanical properties of TiAl alloys consolidated by spark plasma sintering. *Intermetallics*, 16(9) :1134–1141.
- [Couret et al., 2017] Couret, A., Voisin, T., Thomas, M., and Monchoux, J.-P. (2017). Development of a TiAl alloy by spark plasma sintering. *JOM*, 69(12) :2576–2582.



- [Cruzado et al., 2017] Cruzado, A., LLorca, J., and Segurado, J. (2017). Modeling cyclic deformation of inconel 718 superalloy by means of crystal plasticity and computational homogenization. *International Journal of Solids and Structures*, 122 :148–161.
- [Cruzado et al., 2018] Cruzado, A., Lucarini, S., LLorca, J., and Segurado, J. (2018). Microstructure-based fatigue life model of metallic alloys with bilinear Coffin-Manson behavior. *International Journal of Fatigue*, 107 :40–48.
- [Daum et al., 2013] Daum, B., Dehm, G., Clemens, H., Rester, M., Fischer, F., and Rammertorfer, F. (2013). Elastoplastic buckling as source of misinterpretation of micropillar tests. *Acta materialia*, 61(13) :4996–5007.
- [Denquin and Naka, 1993] Denquin, A. and Naka, S. (1993). On the existence of transformation-induced antiphase boundaries in the  $\gamma$ -phase of two-phase TiAl-based alloys. *Philosophical magazine letters*, 68(1) :13–20.
- [Denquin and Naka, 1996] Denquin, A. and Naka, S. (1996). Phase transformation mechanisms involved in two-phase TiAl-based alloys—I. Lamellar structure formation. *Acta materialia*, 44(1) :343–352.
- [Di Gioacchino and Da Fonseca, 2013] Di Gioacchino, F. and Da Fonseca, J. Q. (2013). Plastic strain mapping with sub-micron resolution using digital image correlation. *Experimental Mechanics*, 53(5) :743–754.
- [Ding et al., 2017] Ding, J., Liang, Y., Xu, X., Yu, H., Dong, C., and Lin, J. (2017). Cyclic deformation and microstructure evolution of high Nb containing TiAl alloy during high temperature low cycle fatigue. *International Journal of Fatigue*, 99 :68–77.
- [Dirrenberger and Forest, 2010] Dirrenberger, J. and Forest, S. (2010). Simulation et homogénéisation de microstructures périodiques.
- [Dong et al., 2017] Dong, S., Yu, Q., Jiang, Y., Dong, J., Wang, F., Jin, L., and Ding, W. (2017). Characteristic cyclic plastic deformation in ZK60 magnesium alloy. *International Journal of Plasticity*, 91 :25–47.
- [Donin de Rosière, 2019] Donin de Rosière, V. (2019). *Rapport de stage*. PhD thesis.
- [Du et al., 2018] Du, Y., Shen, J., Xiong, Y., Shang, Z., Qin, L., and Fu, H. (2018). Microstructural development and room temperature tensile property of directionally solidified Ti-47Al alloys by electromagnetic confinement and directional solidification. *Journal of Materials Research*, 33(8) :958–966.
- [Dunstan and Bushby, 2014] Dunstan, D. and Bushby, A. (2014). Grain size dependence of the strength of metals : The Hall–Petch effect does not scale as the inverse square root of grain size. *International Journal of Plasticity*, 53 :56–65.
- [Dvorak, 1992] Dvorak, G. J. (1992). Transformation field analysis of inelastic composite materials. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences*, 437(1900) :311–327.
- [Edwards, 2018a] Edwards, T. (2018a). Recent progress in the high-cycle fatigue behaviour of  $\gamma$ -TiAl alloys. *Materials Science and Technology*, 34(16) :1919–1939.
- [Edwards et al., 2017] Edwards, T., Di Gioacchino, F., Springbett, H., Oliver, R., and Clegg, W. (2017). Stable speckle patterns for nano-scale strain mapping up to 700 °C. *Experimental mechanics*, 57(9) :1469–1482.
- [Edwards, 2018b] Edwards, T. E. J. (2018b). *Plasticity of  $\gamma$ -TiAl alloys*. PhD thesis, University of Cambridge.
- [Edwards et al., 2019a] Edwards, T. E. J., Di Gioacchino, F., and Clegg, W. J. (2019a). An experimental study of the polycrystalline plasticity of lamellar titanium aluminide. *International Journal of Plasticity*, 118 :291–319.

- [Edwards et al., 2019b] Edwards, T. E. J., Di Gioacchino, F., Goodfellow, A. J., Mohanty, G., Wehrs, J., Michler, J., and Clegg, W. J. (2019b). Deformation of lamellar  $\gamma$ -TiAl below the general yield stress. *Acta Materialia*, 163 :122–139.
- [Edwards et al., 2019c] Edwards, T. E. J., Di Gioacchino, F., Goodfellow, A. J., Mohanty, G., Wehrs, J., Michler, J., and Clegg, W. J. (2019c). Transverse deformation of a lamellar TiAl alloy at high temperature by in situ microcompression. *Acta Materialia*, 166 :85–99.
- [Edwards et al., 2018] Edwards, T. E. J., Di Gioacchino, F., Mohanty, G., Wehrs, J., Michler, J., and Clegg, W. J. (2018). Longitudinal twinning in a TiAl alloy at high temperature by in situ microcompression. *Acta Materialia*, 148 :202–215.
- [Edwards et al., 2016] Edwards, T. E. J., Di Gioacchino, F., Muñoz-Moreno, R., and Clegg, W. J. (2016). Deformation of lamellar TiAl alloys by longitudinal twinning. *Scripta Materialia*, 118 :46–50.
- [El-Chaikh et al., 2013] El-Chaikh, A., Heckel, T. K., and Christ, H.-J. (2013). Thermomechanical fatigue of titanium aluminides. *International journal of fatigue*, 53 :26–32.
- [Ellyin and Kujawski, 1984] Ellyin, F. and Kujawski, D. (1984). Plastic strain energy in fatigue failure.
- [Erdely et al., 2018] Erdely, P., Staron, P., Maawad, E., Schell, N., Clemens, H., and Mayer, S. (2018). Lattice and phase strain evolution during tensile loading of an intermetallic, multi-phase  $\gamma$ -TiAl based alloy. *Acta Materialia*, 158 :193–205.
- [Fan et al., 2015] Fan, H., Aubry, S., Arsenlis, A., and El-Awady, J. A. (2015). The role of twinning deformation on the hardening response of polycrystalline magnesium from discrete dislocation dynamics simulations. *Acta Materialia*, 92 :126–139.
- [Farenc et al., 1993] Farenc, S., Coujou, A., and Couret, A. (1993). An in situ study of twin propagation in TiAl. *Philosophical Magazine A*, 67(1) :127–142.
- [Farooq et al., 2020] Farooq, H., Cailletaud, G., Forest, S., and Ryckelynck, D. (2020). Crystal plasticity modeling of the cyclic behavior of polycrystalline aggregates under non-symmetric uniaxial loading : Global and local analyses. *International Journal of Plasticity*, 126 :102619.
- [Fatemi and Socie, 1988] Fatemi, A. and Socie, D. F. (1988). A critical plane approach to multiaxial fatigue damage including out-of-phase loading. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 11(3) :149–165.
- [Feaugas and Haddou, 2003] Feaugas, X. and Haddou, H. (2003). Grain-size effects on tensile behavior of nickel and AISI 316L stainless steel. *Metallurgical and materials transactions A*, 34(10) :2329–2340.
- [Feyel, 1999] Feyel, F. (1999). Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. *Computational Materials Science*, 16(1-4) :344–354.
- [Fournier et al., 2006] Fournier, B., Sauzay, M., Caës, C., Noblecourt, M., and Mottot, M. (2006). Analysis of the hysteresis loops of a martensitic steel : Part I : Study of the influence of strain amplitude and temperature under pure fatigue loadings using an enhanced stress partitioning method. *Materials Science and Engineering : A*, 437(2) :183–196.
- [Frederick and Armstrong, 2007] Frederick, C. O. and Armstrong, P. (2007). A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect. *Materials at High Temperatures*, 24(1) :1–26.
- [Fu and Yoo, 1990] Fu, C. and Yoo, M. (1990). Elastic constants, fault energies, and dislocation reactions in TiAl : A first-principles total-energy investigation. *Philosophical Magazine Letters*, 62(3) :159–165.

- [Fu et al., 1995] Fu, C., Zou, J., and Yoo, M. (1995). Elastic constants and planar fault energies of Ti<sub>3</sub>Al, and interfacial energies at the Ti<sub>3</sub>Al-TiAl interface by first-principles calculations. *Scripta metallurgica et materialia*, 33(6) :885–891.
- [Fujiwara et al., 1990] Fujiwara, T., Nakamura, A., Hosomi, M., Nishitani, S., Shirai, Y., and Yamaguchi, M. (1990). Deformation of polysynthetically twinned crystals of TiAl with a nearly stoichiometric composition. *Philosophical Magazine A*, 61(4) :591–606.
- [Garaud et al., 2017] Garaud, J.-D., Feld-Payet, S., Bettonte, F., Tireira, A., Le Sant, Y., Le Besnerais, G., and Belon, S. (2017). escale : plateforme logicielle pour le dialogue essai-calcul.
- [Garud, 1981] Garud, Y. (1981). A new approach to the evaluation of fatigue under multiaxial loadings.
- [Gélébart, 2002] Gélébart, L. (2002). *Approche multi-échelles du comportement mécanique de l’alliage Ti-Al<sub>48</sub>-Cr<sub>2</sub>-Nb<sub>2</sub>*. PhD thesis.
- [Geoffroy, 2013] Geoffroy, D. (2013). *Modélisation de l’amorçage et de la propagation de fissures dans les microstructures polycristallines. Application au  $\gamma$ -TiAl*. PhD thesis.
- [Gérard et al., 2009] Gérard, C., Bacroix, B., Bornert, M., Cailletaud, G., Crépin, J., and Leclercq, S. (2009). Hardening description for FCC materials under complex loading paths. *Computational Materials Science*, 45(3) :751–755.
- [Geuzaine and Remacle, 2009] Geuzaine, C. and Remacle, J.-F. (2009). Gmsh : A 3-d finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. *International journal for numerical methods in engineering*, 79(11) :1309–1331.
- [Ghosh et al., 2016] Ghosh, S., Shahba, A., Tu, X., Huskins, E. L., and Schuster, B. E. (2016). Crystal plasticity FE modeling of Ti alloys for a range of strain-rates. Part II : Image-based model with experimental validation. *International Journal of Plasticity*, 87 :69–85.
- [Gloanec et al., 2005] Gloanec, A., Henaff, G., Jouiad, M., Bertheau, D., Belaygue, P., and Grange, M. (2005). Cyclic deformation mechanisms in a gamma titanium aluminide alloy at room temperature. *Scripta materialia*, 52(2) :107–111.
- [Gloanec et al., 2007] Gloanec, A.-L., Jouiad, M., Bertheau, D., Grange, M., and Hénaff, G. (2007). Low-cycle fatigue and deformation substructures in an engineering TiAl alloy. *Intermetallics*, 15(4) :520–531.
- [Gloanec et al., 2010] Gloanec, A.-L., Milani, T., and Henaff, G. (2010). Impact of microstructure, temperature and strain ratio on energy-based low-cycle fatigue life prediction models for TiAl alloys. *International journal of fatigue*, 32(7) :1015–1021.
- [Goo, 1998] Goo, E. (1998). Application of von Mises criterion to single and dual phase TiAl. *Scripta materialia*, 38(11) :1711–1716.
- [Grange et al., 2004] Grange, M., Raviart, J., and Thomas, M. (2004). Influence of microstructure on tensile and creep properties of a new castable TiAl-based alloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 35(7) :2087–2102.
- [Groeber et al., 2008] Groeber, M., Ghosh, S., Uchic, M. D., and Dimiduk, D. M. (2008). A framework for automated analysis and simulation of 3D polycrystalline microstructures. : Part 1 : Statistical characterization. *Acta Materialia*, 56(6) :1257–1273.
- [Groves and Kelly, 1963] Groves, G. W. and Kelly, A. (1963). Independent slip systems in crystals. *Philosophical Magazine*, 8(89) :877–887.
- [Grujicic and Batchu, 2001] Grujicic, M. and Batchu, S. (2001). A crystal plasticity materials constitutive model for polysynthetically-twinned  $\gamma$ -TiAl+  $\alpha$ <sub>2</sub>-Ti<sub>3</sub>Al single crystals. *Journal of materials science*, 36(12) :2851–2863.

- [Guery et al., 2016] Guery, A., Hild, F., Latourte, F., and Roux, S. (2016). Identification of crystal plasticity parameters using DIC measurements and weighted FEMU. *Mechanics of Materials*, 100 :55–71.
- [Guery et al., 2013] Guery, A., Latourte, F., Hild, F., and Roux, S. (2013). Characterization of SEM speckle pattern marking and imaging distortion by digital image correlation. *Measurement Science and Technology*, 25(1) :015401.
- [Guilhem et al., 2010] Guilhem, Y., Basseville, S., Curtit, F., Stephan, J.-M., and Cailletaud, G. (2010). Investigation of the effect of grain clusters on fatigue crack initiation in polycrystals. *International Journal of Fatigue*, 32(11) :1748–1763.
- [Guilhem et al., 2013] Guilhem, Y., Basseville, S., Curtit, F., Stephan, J.-M., and Cailletaud, G. (2013). Numerical investigations of the free surface effect in three-dimensional polycrystalline aggregates. *Computational Materials Science*, 70 :150–162.
- [He et al., 1995] He, Y., Schwarz, R., Migliori, A., and Whang, S. (1995). Elastic constants of single crystal  $\gamma$ -TiAl. *Journal of materials research*, 10(5) :1187–1195.
- [Heckel and Christ, 2010] Heckel, T. K. and Christ, H.-J. (2010). Isothermal and thermomechanical fatigue of titanium alloys. *Procedia Engineering*, 2(1) :845–854.
- [Hénaff and Gloanec, 2005] Hénaff, G. and Gloanec, A.-L. (2005). Fatigue properties of TiAl alloys. *Intermetallics*, 13(5) :543–558.
- [Héripéré, 2006] Héripéré, E. (2006). *Méthode de couplage multi-échelles entre simulations numériques polycristallines et mesures de champs pour l'identification des paramètres de lois de comportement et de fissuration des matériaux métalliques. Application à l'étude des alliages TiAl*. PhD thesis.
- [Heripre et al., 2007] Heripre, E., Dexet, M., Crepin, J., Gélebart, L., Roos, A., Bornert, M., and Caldemaison, D. (2007). Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials. *International Journal of Plasticity*, 23(9) :1512–1539.
- [Hild, 2004] Hild, F. (2004). Mesure de champs de déplacement par corrélation d'images et applications en mécanique des solides.
- [Hoppe and Appel, 2014] Hoppe, R. and Appel, F. (2014). Deformation-induced internal stresses in multiphase titanium aluminum alloys. *Acta materialia*, 64 :169–178.
- [Hor et al., 2014] Hor, A., Saintier, N., Robert, C., Palin-Luc, T., and Morel, F. (2014). Statistical assessment of multiaxial HCF criteria at the grain scale. *International journal of fatigue*, 67 :151–158.
- [Huang, 1989] Huang, S.-C. (1989). Titanium aluminum alloys modified by chromium and niobium and method of preparation. US Patent 4,879,092.
- [Hug et al., 1988] Hug, G., Loiseau, A., and Veyssiere, P. (1988). Weak-beam observation of a dissociation transition in TiAl. *Philosophical Magazine A*, 57(3) :499–523.
- [Içöz et al., 2014] Içöz, C., Patriarca, L., Filippini, M., and Beretta, S. (2014). Strain accumulation in TiAl intermetallics via high-resolution digital image correlation (DIC). *Procedia Engineering*, 74 :443–448.
- [Inui et al., 1995] Inui, H., Kishida, K., Misaki, M., Kobayashi, M., Shirai, Y., and Yamaguchi, M. (1995). Temperature dependence of yield stress, tensile elongation and deformation structures in polysynthetically twinned crystals of Ti-Al. *Philosophical magazine a*, 72(6) :1609–1631.
- [Inui et al., 1997] Inui, H., Matsumuro, M., Wu, D.-H., and Yamaguchi, M. (1997). Temperature dependence of yield stress, deformation mode and deformation structure in single crystals of TiAl (Ti-56 at.% Al). *Philosophical Magazine A*, 75(2) :395–423.

- [Inui et al., 1992] Inui, H., Oh, M., Nakamura, A., and Yamaguchi, M. (1992). Room-temperature tensile deformation of polysynthetically twinned (PST) crystals of TiAl. *Acta Metallurgica et Materialia*, 40(11) :3095–3104.
- [Inui et al., 1993] Inui, H., Toda, Y., and Yamaguchi, M. (1993). Plastic deformation of single crystals of a DO19 compound with an off-stoichiometric composition (Ti-36.5 at.% Al) at room temperature. *Philosophical Magazine A*, 67(6) :1315–1332.
- [Jha et al., 2005] Jha, S., Larsen, J., and Rosenberger, A. (2005). The role of competing mechanisms in the fatigue life variability of a nearly fully-lamellar  $\gamma$ -TiAl based alloy. *Acta Materialia*, 53(5) :1293–1304.
- [Jiang et al., 2009] Jiang, H., Garcia-Pastor, F., Hu, D., Wu, X., Loretto, M., Preuss, M., and Withers, P. J. (2009). Characterization of microplasticity in TiAl-based alloys. *Acta materialia*, 57(5) :1357–1366.
- [Jiang et al., 2007] Jiang, Y., Hertel, O., and Vormwald, M. (2007). An experimental evaluation of three critical plane multiaxial fatigue criteria. *International Journal of Fatigue*, 29(8) :1490–1502.
- [Jiao et al., 1998] Jiao, S., Bird, N., Hirsch, P., and Taylor, G. (1998). Yield stress anomalies in single crystals of Ti-54.5 at.% Al : I. overview and (011) superdislocation slip. *Philosophical Magazine A*, 78(3) :777–802.
- [Jung et al., 1996] Jung, J., Park, J. K., Chun, C., and Her, S. (1996). Hall—petch relation in two-phase TiAl alloys. *Materials Science and Engineering : A*, 220(1-2) :185–190.
- [Kabir et al., 2015] Kabir, M., Bartsch, M., Chernova, L., Kelm, K., and Wischek, J. (2015). Correlations between microstructure and room temperature tensile behavior of a duplex TNB alloy for systematically heat treated samples. *Materials Science and Engineering : A*, 635 :13–22.
- [Kabir and Cornec, 2019] Kabir, M. and Cornec, A. (2019). Grain-wise simulation of stochastic damage and failure verified on a TiAl polycrystal. *Materials Science and Engineering : A*, 748 :146–160.
- [Kabir et al., 2010] Kabir, M. R., Chernova, L., and Bartsch, M. (2010). Numerical investigation of room-temperature deformation behavior of a duplex type  $\gamma$ -TiAl alloy using a multi-scale modeling approach. *Acta Materialia*, 58(17) :5834–5847.
- [Kad et al., 1995] Kad, B. K., Dao, M., and Asaro, R. J. (1995). Numerical simulations of plastic deformation and fracture effects in two phase  $\gamma$ -TiAl+  $\alpha$ 2-Ti3Al lamellar microstructures. *Philosophical Magazine A*, 71(3) :567–604.
- [Kanit et al., 2003] Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., and Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of solids and structures*, 40(13-14) :3647–3679.
- [Karaman et al., 2001] Karaman, I., Sehitoglu, H., Chumlyakov, Y. I., Maier, H. J., and Kireeva, I. (2001). The effect of twinning and slip on the Bauschinger effect of Hadfield steel single crystals. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 32(13) :695–706.
- [Karuskevich et al., 2012] Karuskevich, M., Karuskevich, O., Maslak, T., and Schepak, S. (2012). Extrusion/intrusion structures as quantitative indicators of accumulated fatigue damage. *International Journal of Fatigue*, 39 :116–121.
- [Kauffmann et al., 2000a] Kauffmann, F., Bidlingmaier, T., Dehm, G., Wanner, A., and Clemens, H. (2000a). On the origin of acoustic emission during room temperature compressive deformation of a  $\gamma$ -TiAl based alloy. *Intermetallics*, 8(7) :823–830.

- [Kauffmann et al., 2000b] Kauffmann, F., Bidlingmaier, T., Dehm, G., Wanner, A., and Clemens, H. (2000b). On the origin of acoustic emission during room temperature compressive deformation of a  $\gamma$ -TiAl based alloy. *Intermetallics*, 8(7) :823–830.
- [Kim, 1995] Kim, Y.-W. (1995). Effects of microstructure on the deformation and fracture of  $\gamma$ -TiAl alloys. *Materials Science and Engineering : A*, 192 :519–533.
- [Kim and Dimiduk, 1991] Kim, Y.-W. and Dimiduk, D. M. (1991). Progress in the understanding of gamma titanium aluminides. *Jom*, 43(8) :40–47.
- [Kim and Kim, 2018] Kim, Y.-W. and Kim, S.-L. (2018). Advances in gammalloy materials–processes–application technology : Successes, dilemmas, and future. *Jom*, 70(4) :553–560.
- [Kishida et al., 1998] Kishida, K., Inui, H., and Yamaguchi, M. (1998). Deformation of lamellar structure in TiAl-Ti3Al two-phase alloys. *Philosophical Magazine A*, 78(1) :1–28.
- [Kishida et al., 1999] Kishida, K., Inui, H., and Yamaguchi, M. (1999). Deformation of pst crystals of a TiAl/Ti3Al two-phase alloy at 1000° C. *Intermetallics*, 7(10) :1131–1139.
- [Korsunsky et al., 2007] Korsunsky, A. M., Dini, D., Dunne, F. P., and Walsh, M. J. (2007). Comparative assessment of dissipated energy and other fatigue criteria. *International journal of fatigue*, 29(9-11) :1990–1995.
- [Kowalczyk-Gajewska, 2011] Kowalczyk-Gajewska, K. (2011). Micromechanical model of polycrystalline materials with lamellar substructure. *Archives of Metallurgy and Materials*, 56 :509–522.
- [Kruch et al., 2015] Kruch, S., Kanouté, P., BONNAND, V., and Multiaxial, O. (2015). Anisothermal lifetime assessment for engine components. *Aerospace Lab*, (09).
- [Kruml and Obrtlík, 2014] Kruml, T. and Obrtlík, K. (2014). Microstructure degradation in high temperature fatigue of TiAl alloy. *International Journal of Fatigue*, 65 :28–32.
- [Kuhlmann-Wilsdorf and Laird, 1979] Kuhlmann-Wilsdorf, D. and Laird, C. (1979). Dislocation behavior in fatigue II. friction stress and back stress as inferred from an analysis of hysteresis loops. *Materials Science and Engineering*, 37(2) :111–120.
- [Lapin and Gabalcová, 2011] Lapin, J. and Gabalcová, Z. (2011). Solidification behaviour of TiAl-based alloys studied by directional solidification technique. *Intermetallics*, 19(6) :797–804.
- [Larsen Jr, 1995] Larsen Jr, D. E. (1995). TiAl intermetallic articles. US Patent 5,429,796.
- [Le Besnerais et al., 2016] Le Besnerais, G., Le Sant, Y., and Lévêque, D. (2016). Fast and dense 2D and 3D displacement field estimation by a highly parallel image correlation algorithm. *Strain*, 52(4) :286–306.
- [Lebensohn, 1999] Lebensohn, R. (1999). Modelling the role of local correlations in polycrystal plasticity using viscoplastic self-consistent schemes. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 7(5) :739.
- [Lebensohn et al., 1998] Lebensohn, R., Uhlenhut, H., Hartig, C., and Mecking, H. (1998). Plastic flow of  $\gamma$ -TiAl-based polysynthetically twinned crystals : micromechanical modeling and experimental validation. *Acta materialia*, 46(13) :4701–4709.
- [Lebensohn et al., 2008] Lebensohn, R. A., Brenner, R., Castelnau, O., and Rollett, A. D. (2008). Orientation image-based micromechanical modelling of subgrain texture evolution in polycrystalline copper. *Acta Materialia*, 56(15) :3914–3926.
- [Leitner et al., 2014] Leitner, T., Schloffer, M., Mayer, S., Eßlinger, J., Clemens, H., and Pippan, R. (2014). Fracture and R-curve behavior of an intermetallic  $\beta$ -stabilized TiAl alloy with different nearly lamellar microstructures. *Intermetallics*, 53 :1–9.

- [Lemaitre et al., 2009] Lemaitre, J., Chaboche, J.-L., Benallal, A., and Desmorat, R. (2009). *Mécanique des matériaux solides-3eme édition*. Dunod.
- [Liu and Maziasz, 1998] Liu, C. and Maziasz, P. (1998). Microstructural control and mechanical properties of dual-phase TiAl alloys. *Intermetallics*, 6(7-8) :653–661.
- [Löfl et al., 2019] Löfl, C., Saage, H., and Göken, M. (2019). In situ X-ray tomography investigation of the crack formation in an intermetallic beta-stabilized TiAl-alloy during a stepwise tensile loading. *International Journal of Fatigue*, 124 :138–148.
- [Mahouas, 2016] Mahouas, R. (2016). *Rapport de stage*. PhD thesis.
- [Manonukul and Dunne, 2004] Manonukul, A. and Dunne, F. (2004). High and low cycle fatigue crack initiation using polycrystal plasticity. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 460(2047) :1881–1903.
- [Marano et al., 2019] Marano, A., Gélébart, L., and Forest, S. (2019). Intragranular localization induced by softening crystal plasticity : Analysis of slip and kink bands localization modes from high resolution FFT-simulations results. *Acta Materialia*, 175 :262–275.
- [Marchenko et al., 2016] Marchenko, A., Maziere, M., Forest, S., and Strudel, J.-L. (2016). Crystal plasticity simulation of strain aging phenomena in  $\alpha$ -titanium at room temperature. *International Journal of Plasticity*, 85 :1–33.
- [Marketz et al., 2003] Marketz, W., Fischer, F., and Clemens, H. (2003). Deformation mechanisms in TiAl intermetallics—experiments and modeling. *International Journal of Plasticity*, 19(3) :281–321.
- [Martin, 2012] Martin, G. (2012). *Simulation numérique multi-échelles du comportement mécanique des alliages de titane bêta-métastable Ti5553 et Ti17*. PhD thesis.
- [Mayeur and McDowell, 2007] Mayeur, J. and McDowell, D. (2007). A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti-6Al-4v. *International journal of plasticity*, 23(9) :1457–1485.
- [McCullough et al., 1989] McCullough, C., Valencia, J., Levi, C., and Mehrabian, R. (1989). Phase equilibria and solidification in Ti-Al alloys. *Acta Metallurgica*, 37(5) :1321–1336.
- [McDowell and Dunne, 2010] McDowell, D. and Dunne, F. (2010). Microstructure-sensitive computational modeling of fatigue crack formation. *International journal of fatigue*, 32(9) :1521–1542.
- [McDowell, 2007] McDowell, D. L. (2007). Simulation-based strategies for microstructure-sensitive fatigue modeling. *Materials Science and Engineering : A*, 468 :4–14.
- [Méric and Cailletaud, 1991] Méric, L. and Cailletaud, G. (1991). Single crystal modeling for structural calculations : Part 2—finite element implementation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113(1) :171–182.
- [Minonishi, 1995] Minonishi, Y. (1995). Dissociation of  $13\langle 1126 \rangle\{1121\}$  superdislocations in Ti3Al single crystals deformed at high temperatures. *Materials Science and Engineering : A*, 192 :830–836.
- [Mises, 1928] Mises, R. v. (1928). Mechanik der plastischen formänderung von kristallen. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 8(3) :161–185.
- [Monchoux et al., 2017] Monchoux, J.-P., Luo, J., Voisin, T., and Couret, A. (2017). Deformation modes and size effect in near- $\gamma$  TiAl alloys. *Materials Science and Engineering : A*, 679 :123–132.
- [Moulinec and Suquet, 1998] Moulinec, H. and 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.

- [Mughrabi, 2013] Mughrabi, H. (2013). Microstructural fatigue mechanisms : Cyclic slip irreversibility, crack initiation, non-linear elastic damage analysis. *International Journal of Fatigue*, 57 :2–8.
- [Muralidharan and Manson, 1988] Muralidharan, U. and Manson, S. (1988). A modified universal slopes equation for estimation of fatigue characteristics of metals.
- [Naanani, 2018] Naanani, S. (2018). *Etude du comportement à hautes températures d'un alliage TiAl performant densifié par frittage flash*. PhD thesis, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier.
- [Naanani et al., 2018] Naanani, S., Hantcherli, M., Hor, A., Mabru, C., Monchoux, J.-P., and Couret, A. (2018). Study of the low cyclic behaviour of the IRIS alloy at high temperature. In *MATEC Web of Conferences*, volume 165, page 06007. EDP Sciences.
- [Naka et al., 1998] Naka, S., Thomas, M., Bachelier-Locq, A., and Khan, T. (1998). Intermetallic alloy based on titanium aluminide for casting. US Patent 5,846,345.
- [Niendorf et al., 2009] Niendorf, T., Burs, C., Canadinc, D., and Maier, H. J. (2009). Early detection of crack initiation sites in TiAl alloys during low-cycle fatigue at high temperatures utilizing digital image correlation. *International journal of materials research*, 100(4) :603–608.
- [Ohno and Wang, 1993] Ohno, N. and Wang, J.-D. (1993). Kinematic hardening rules with critical state of dynamic recovery, part I : formulation and basic features for ratchetting behavior. *International journal of plasticity*, 9(3) :375–390.
- [Onimus and Béchade, 2009] Onimus, F. and Béchade, J.-L. (2009). A polycrystalline modeling of the mechanical behavior of neutron irradiated zirconium alloys. *Journal of Nuclear Materials*, 384(2) :163–174.
- [Paidar and Yamaguchi, 2007] Paidar, V. and Yamaguchi, M. (2007). Constrained deformation of a lamellar structure. *Materials Science and Engineering : A*, 462(1-2) :460–464.
- [Palomares-García et al., 2017] Palomares-García, A. J., Pérez-Prado, M. T., and Molina-Aldareguia, J. M. (2017). Effect of lamellar orientation on the strength and operating deformation mechanisms of fully lamellar TiAl alloys determined by micropillar compression. *Acta Materialia*, 123 :102–114.
- [Park et al., 2002] Park, Y. S., Nam, S. W., Hwang, S. K., and Kim, N. J. (2002). The effect of the applied strain range on fatigue cracking in lamellar TiAl alloy. *Journal of Alloys and compounds*, 335(1-2) :216–223.
- [Parteder et al., 1995] Parteder, E., Siegmund, T., Fischer, F., and Schlägl, S. (1995). Numerical simulation of the plastic behavior of polysynthetically twinned tial crystals. *Materials Science and Engineering : A*, 192 :149–154.
- [Parthasarathy et al., 1998] Parthasarathy, T., Mendiratta, M., and Dimiduk, D. (1998). Flow behavior of PST and fully lamellar polycrystals of Ti-48Al in the microstrain regime. *Acta materialia*, 46(11) :4005–4016.
- [Patriarca et al., 2016] Patriarca, L., Filippini, M., and Beretta, S. (2016). Digital image correlation-based analysis of strain accumulation on a duplex  $\gamma$ -TiAl. *Intermetallics*, 75 :42–50.
- [Paul et al., 2016] Paul, J. D., Hoppe, R., and Appel, F. (2016). On the bauschinger effect in TiAl alloys. *Acta Materialia*, 104 :101–108.
- [Polák et al., 2016] Polák, J., Petráš, R., Heczko, M., Kruml, T., and Chai, G. (2016). Evolution of the cyclic plastic response of Sanicro 25 steel cycled at ambient and elevated temperatures. *International Journal of Fatigue*, 83 :75–83.



- [Porter et al., 2009] Porter, W., Uchic, M., John, R., and Barnas, N. (2009). Compression property determination of a gamma titanium aluminide alloy using micro-specimens. *Scripta Materialia*, 61(7) :678–681.
- [Pragnell et al., 1992] Pragnell, P., Stobbs, W., and Withers, P. (1992). Considerations in the use of yield asymmetries for the analysis of internal stresses in metal matrix composites. *Materials Science and Engineering : A*, 159(1) :51–63.
- [Prangnell et al., 1995] Prangnell, P., Downes, T., Withers, P., and Lorentzen, T. (1995). An examination of the mean stress contribution to the Bauschinger effect by neutron diffraction. *Materials Science and Engineering : A*, 197(2) :215–221.
- [Prithivirajan and Sangid, 2018] Prithivirajan, V. and Sangid, M. D. (2018). The role of defects and critical pore size analysis in the fatigue response of additively manufactured IN718 via crystal plasticity. *Materials & Design*, 150 :139–153.
- [Prithivirajan and Sangid, 2020] Prithivirajan, V. and Sangid, M. D. (2020). Examining metrics for fatigue life predictions of additively manufactured IN718 via crystal plasticity modeling including the role of simulation volume and microstructural constraints. *Materials Science and Engineering : A*, page 139312.
- [Proudhon et al., 2018] Proudhon, H., Guéinichault, N., Forest, S., and Ludwig, W. (2018). Incipient bulk polycrystal plasticity observed by synchrotron in-situ topotomography. *Materials*, 11(10).
- [Przybyla and McDowell, 2010] Przybyla, C. P. and McDowell, D. L. (2010). Microstructure-sensitive extreme value probabilities for high cycle fatigue of Ni-base superalloy IN100. *International Journal of Plasticity*, 26(3) :372–394.
- [Przybyla and McDowell, 2011] Przybyla, C. P. and McDowell, D. L. (2011). Simulated microstructure-sensitive extreme value probabilities for high cycle fatigue of duplex Ti-6Al-4V. *International Journal of Plasticity*, 27(12) :1871–1895.
- [Quey et al., 2011] Quey, R., Dawson, P., and Barbe, F. (2011). Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(17-20) :1729–1745.
- [Quey and Renversade, 2018] Quey, R. and Renversade, L. (2018). Optimal polyhedral description of 3d polycrystals : Method and application to statistical and synchrotron X-ray diffraction data. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 330 :308–333.
- [Quey et al., 2018] Quey, R., Villani, A., and Maurice, C. (2018). Nearly uniform sampling of crystal orientations. *Journal of Applied Crystallography*, 51(4).
- [Queyreau et al., 2009] Queyreau, S., Monnet, G., and Devincere, B. (2009). Slip systems interactions in  $\alpha$ -iron determined by dislocation dynamics simulations. *International Journal of Plasticity*, 25(2) :361–377.
- [Robert and Mareau, 2015] Robert, C. and Mareau, C. (2015). A comparison between different numerical methods for the modeling of polycrystalline materials with an elastic–viscoplastic behavior. *Computational Materials Science*, 103 :134–144.
- [Roos et al., 2004] Roos, A., Chaboche, J.-L., Gélébart, L., and Crépin, J. (2004). Multiscale modelling of titanium aluminides. *International Journal of Plasticity*, 20(4-5) :811–830.
- [Roters et al., 2010] Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D. D., Bieler, T. R., and Raabe, D. (2010). Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling : Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 58(4) :1152–1211.

- [Roth and Biermann, 2008] Roth, M. and Biermann, H. (2008). Thermo-mechanical fatigue behaviour of a modern  $\gamma$ -TiAl alloy. *International Journal of Fatigue*, 30(2) :352–356.
- [Rovinelli et al., 2020] Rovinelli, A., Proudhon, H., Lebensohn, R. A., and Sangid, M. D. (2020). Assessing the reliability of fast fourier transform-based crystal plasticity simulations of a polycrystalline material near a crack tip. *International Journal of Solids and Structures*, 184 :153–166.
- [Russ and Dehoff, 2012] Russ, J. C. and Dehoff, R. T. (2012). *Practical stereology*. Springer Science & Business Media.
- [Sangid, 2013] Sangid, M. D. (2013). The physics of fatigue crack initiation. *International journal of fatigue*, 57 :58–72.
- [Sato et al., 2010] Sato, M., Horibe, S., Nakamura, M., and Uchida, H. (2010). Cyclic deformation and fatigue in TiAl intermetallic compound under plastic strain control. *International Journal of Fatigue*, 32(4) :698–702.
- [Sauzay, 2006] Sauzay, M. (2006). Effet de l’anisotropie élastique cristalline sur la distribution des facteurs de Schmid à la surface des polycristaux. *Comptes Rendus Mécanique*, 334(6) :353–361.
- [Schallow and Christ, 2013] Schallow, P. and Christ, H.-J. (2013). High-temperature fatigue behaviour of a second generation near- $\gamma$  titanium aluminide sheet material under isothermal and thermomechanical conditions. *International journal of fatigue*, 53 :15–25.
- [Schlo et al., 1996] Schlo, S., Fischer, F., et al. (1996). Micromechanical modelling of TiAl intermetallics. *Computational materials science*, 7(1-2) :34–39.
- [Schnabel and Bargmann, 2017] Schnabel, J. E. and Bargmann, S. (2017). Accessing colony boundary strengthening of fully lamellar TiAl alloys via micromechanical modeling. *Materials*, 10(8) :896.
- [Schnabel et al., 2019] Schnabel, J. E., Bargmann, S., Paul, J. D. H., Oehring, M., and Pyczak, F. (2019). Work hardening and recovery in fully lamellar TiAl : relative activity of deformation systems. *Philosophical Magazine*, 99(2) :148–180.
- [Schneider et al., 2012] Schneider, C. A., Rasband, W. S., and Eliceiri, K. W. (2012). Nih image to ImageJ : 25 years of image analysis. *Nature methods*, 9(7) :671.
- [Schwaighofer et al., 2014] Schwaighofer, E., Clemens, H., Mayer, S., Lindemann, J., Klose, J., Smarsly, W., and Güther, V. (2014). Microstructural design and mechanical properties of a cast and heat-treated intermetallic multi-phase  $\gamma$ -TiAl based alloy. *Intermetallics*, 44 :128–140.
- [Shenoy et al., 2007] Shenoy, M., Zhang, J., and McDowell, D. L. (2007). Estimating fatigue sensitivity to polycrystalline Ni-base superalloy microstructures using a computational approach. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 30(10) :889–904.
- [Signor et al., 2016] Signor, L., Villechaise, P., Ghidossi, T., Lacoste, E., Gueguen, M., and Courtin, S. (2016). Influence of local crystallographic configuration on microcrack initiation in fatigued 316LN stainless steel : Experiments and crystal plasticity finite elements simulations. *Materials Science and Engineering : A*, 649 :239–249.
- [Smarsly et al., 2018] Smarsly, W., Clemens, H., and Schwaighofer, E. (2018). Creep-resistant TiAl alloy. US Patent 9,994,934.
- [Smith et al., 2018] Smith, B., Shih, D., and McDowell, D. (2018). Cyclic plasticity experiments and polycrystal plasticity modeling of three distinct Ti alloy microstructures. *International Journal of Plasticity*, 101 :1–23.

- [Smith et al., 2016] Smith, B. D., Shih, D. S., and McDowell, D. L. (2016). Fatigue hot spot simulation for two Widmanstätten titanium microstructures. *International Journal of Fatigue*, 92 :116–129.
- [Smith et al., 1970] Smith, R., Watson, P., and Topper, T. (1970). A stress-strain parameter for the fatigue of metals. *Journal of Materials*, 5(4) :767–778.
- [Socie and Marquis, 2000] Socie, D. F. and Marquis, G. B. (2000). *Multiaxial fatigue*. Society of Automotive Engineers Warrendale, PA.
- [Spetl et al., 2014] Spetl, A., Werz, T., Krill, C. E., and Schmidt, V. (2014). Parametric representation of 3D grain ensembles in polycrystalline microstructures. *Journal of Statistical Physics*, 154(4) :913–928.
- [Sweeney et al., 2012] Sweeney, C., McHugh, P., McGarry, J., and Leen, S. (2012). Micromechanical methodology for fatigue in cardiovascular stents. *International Journal of Fatigue*, 44 :202–216.
- [Tanaka, 1996] Tanaka, K. (1996). Single-crystal elastic constants of gamma-TiAl. *Philosophical magazine letters*, 73(2) :71–78.
- [Tanaka and Mura, 1981] Tanaka, K. and Mura, T. (1981). A dislocation model for fatigue crack initiation.
- [Tanaka et al., 1996] Tanaka, K., Okamoto, K., Inui, H., Minonishi, Y., Yamaguchi, M., and Koiwa, M. (1996). Elastic constants and their temperature dependence for the intermetallic compound Ti3Al. *Philosophical Magazine A*, 73(5) :1475–1488.
- [Tang et al., 2002] Tang, J., Huang, B., He, Y., Liu, W., Zhou, K., and Wu, A. (2002). Hall-Petch relationship in two-phase TiAl alloys with fully lamellar microstructures. *Materials research bulletin*, 37(7) :1315–1321.
- [Thieulot-Laure, 2008] Thieulot-Laure, E. (2008). *Méthode probabiliste unifiée pour la prédiction du risque de rupture en fatigue*. PhD thesis.
- [Thomas, 2011] Thomas, M. (2011). Les alliages intermétalliques à base de TiAl. *Techniques de l'ingénieur Métaux et alliages non ferreux*, base documentaire : TIB357DUO.(ref. article : m4782). fre.
- [Thomas and Naka, 2004] Thomas, M. and Naka, S. (2004). Research and development activities on gamma titanium aluminides at ONERA ; activites de recherche et developpement a l'ONERA sur les {gamma}-aluminiums de titane.
- [Uhlenhut, 1999] Uhlenhut, H. (1999). *Ursachen plastischer Anisotropie von [gamma]-TiAl-Basislegierungen [gamma-TiAl-Basislegierungen]*. Shaker.
- [Umakoshi and Nakano, 1992] Umakoshi, Y. and Nakano, T. (1992). Plastic behaviour of TiAl crystals containing a single set of lamellae at high temperatures. *ISIJ international*, 32(12) :1339–1347.
- [Umakoshi et al., 1995] Umakoshi, Y., Yasuda, H., and Nakano, T. (1995). Plastic anisotropy and fracture behavior of cyclically deformed TiAl polysynthetically twinned crystals. *Materials Science and Engineering : A*, 192 :511–517.
- [Umeda et al., 1997] Umeda, H., Kishida, K., Inui, H., and Yamaguchi, M. (1997). Effects of Al-concentration and lamellar spacing on the room-temperature strength and ductility of PST crystals of TiAl. *Materials Science and Engineering : A*, 239 :336–343.
- [Voisin, 2014] Voisin, T. (2014). *Exploration de la voie SPS pour la fabrication d'aubes de turbine pour l'aéronautique : Développement d'un alliage TiAl performant et densification de préformes*. PhD thesis.

- [Voisin et al., 2015] Voisin, T., Monchoux, J.-P., Durand, L., Karnatak, N., Thomas, M., and Couret, A. (2015). An innovative way to produce  $\gamma$ -TiAl blades : spark plasma sintering. *Advanced Engineering Materials*, 17(10) :1408–1413.
- [Voisin et al., 2016a] Voisin, T., Monchoux, J.-P., Perrut, M., and Couret, A. (2016a). Obtaining of a fine near-lamellar microstructure in TiAl alloys by spark plasma sintering. *Intermetallics*, 71 :88–97.
- [Voisin et al., 2016b] Voisin, T., Monchoux, J.-P., Thomas, M., Deshayes, C., and Couret, A. (2016b). Mechanical properties of the TiAl IRIS alloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 47(12) :6097–6108.
- [Wang et al., 2018] Wang, Q., Chen, R., Gong, X., Guo, J., Su, Y., Ding, H., and Fu, H. (2018). Microstructure, mechanical properties, and crack propagation behavior in high-Nb TiAl alloys by directional solidification. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 49(10) :4555–4564.
- [Wegmann et al., 2003] Wegmann, G., Gerling, R., and Schimansky, F.-P. (2003). Temperature induced porosity in hot isostatically pressed gamma titanium aluminide alloy powders. *Acta Materialia*, 51(3) :741–752.
- [Werwer and Cornec, 2000] Werwer, M. and Cornec, A. (2000). Numerical simulation of plastic deformation and fracture in polysynthetically twinned (pst) crystals of TiAl. *Computational materials science*, 19(1-4) :97–107.
- [Werwer and Cornec, 2006] Werwer, M. and Cornec, A. (2006). The role of superdislocations for modeling plastic deformation of lamellar TiAl. *International journal of plasticity*, 22(9) :1683–1698.
- [Wessel et al., 2015] Wessel, W., Zeismann, F., and Brueckner-Foit, A. (2015). Short fatigue cracks in intermetallic  $\gamma$ -TiAl-alloys. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 38(12) :1507–1518.
- [Wiezorek et al., 1997] Wiezorek, J. M., Deluca, P. M., Mills, M. J., and Fraser, H. L. (1997). Deformation mechanisms in a binary Ti-48 at.% Al alloy with lamellar microstructure. *Philosophical magazine letters*, 75(5) :271–280.
- [Wikipédia, 2020] Wikipédia (2020). Turboréacteur — wikipédia, l’encyclopédie libre. [En ligne ; Page disponible le 24-janvier-2020].
- [Wisner et al., 2015] Wisner, B., Cabal, M., Vanniamparambil, P., Hochhalter, J., Leser, W., and Kontsos, A. (2015). In situ microscopic investigation to validate acoustic emission monitoring. *Experimental Mechanics*, 55(9) :1705–1715.
- [Wu, 2006] Wu, X. (2006). Review of alloy and process development of TiAl alloys. *Intermetallics*, 14(10-11) :1114–1122.
- [Wu et al., 2001] Wu, X., Hu, D., Botten, R., and Loretto, M. (2001). The significance of acoustic emission during stressing of TiAl-based alloys. part II : Influence of cracks induced by pre-stressing on the fatigue life. *Acta materialia*, 49(10) :1693–1699.
- [Wu et al., 2004] Wu, X., Hu, D., and Loretto, M. (2004). Alloy and process development of TiAl. *Journal of Materials Science*, 39(12) :3935–3940.
- [Yamaguchi et al., 2000] Yamaguchi, M., Johnson, D., Lee, H., and Inui, H. (2000). Directional solidification of TiAl-base alloys. *Intermetallics*, 8(5-6) :511–517.
- [Yao et al., 1995] Yao, K.-F., Inui, H., Kishida, K., and Yamaguchi, M. (1995). Plastic deformation of V- and Zr-alloyed PST TiAl in tension and compression at room temperature. *Acta metallurgica et materialia*, 43(3) :1075–1086.
- [Yasuda et al., 1996a] Yasuda, H., Nakano, T., and Umakoshi, Y. (1996a). Effect of lamellar structure and plastic anisotropy on the cyclic deformation and fatigue behaviour of TiAl PST crystals. *Philosophical Magazine A*, 73(4) :1053–1067.

- [Yasuda et al., 1996b] Yasuda, H., Nakano, T., and Umakoshi, Y. (1996b). Thermal stability of deformation substructure of cyclically deformed TiAl PST crystals. *Intermetallics*, 4(4) :289–298.
- [Yoo and Fu, 1998] Yoo, M. and Fu, C. (1998). Physical constants, deformation twinning, and microcracking of titanium aluminides. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 29(1) :49–63.
- [Yuan et al., 2018] Yuan, H., Zhang, W., Castelluccio, G. M., Kim, J., and Liu, Y. (2018). Microstructure-sensitive estimation of small fatigue crack growth in bridge steel welds. *International Journal of Fatigue*, 112 :183–197.
- [Zambaldi et al., 2011] Zambaldi, C., Roters, F., and Raabe, D. (2011). Analysis of the plastic anisotropy and pre-yielding of ( $\gamma/\alpha_2$ )-phase titanium aluminide microstructures by crystal plasticity simulation. *Intermetallics*, 19(6) :820–827.
- [Zeghadi et al., 2007] Zeghadi, A., Forest, S., Gourgues, A.-F., and Bouaziz, O. (2007). Ensemble averaging stress–strain fields in polycrystalline aggregates with a constrained surface microstructure—part 2 : Crystal plasticity. *Philosophical Magazine*, 87(8-9) :1425–1446.
- [Zghal et al., 2001] Zghal, S., Coujou, A., and Couret, A. (2001). Transmission of the deformation through  $\gamma$ - $\gamma$  interfaces in a polysynthetically twinned TiAl alloy I. ordered domain interfaces ( $120^\circ$  rotational). *Philosophical Magazine A*, 81(2) :345–364.
- [Zghal and Couret, 2001] Zghal, S. and Couret, A. (2001). Transmission of the deformation through  $\gamma$ - $\gamma$  interfaces in a polysynthetically twinned TiAl alloy II. twin interfaces ( $180^\circ$  rotational). *Philosophical Magazine A*, 81(2) :365–382.
- [Zghal et al., 1997] Zghal, S., Naka, S., and Couret, A. (1997). A quantitative TEM analysis of the lamellar microstructure in TiAl based alloys. *Acta Materialia*, 45(7) :3005–3015.
- [Zhang et al., 2007] Zhang, M., Zhang, J., and McDowell, D. (2007). Microstructure-based crystal plasticity modeling of cyclic deformation of Ti-6Al-4V. *International Journal of Plasticity*, 23(8) :1328–1348.
- [Zhang et al., 2018] Zhang, Z., Lunt, D., Abdolvand, H., Wilkinson, A. J., Preuss, M., and Dunne, F. P. (2018). Quantitative investigation of micro slip and localization in polycrystalline materials under uniaxial tension. *International Journal of Plasticity*, 108 :88–106.
- [Zheng et al., 2004] Zheng, R., Zhang, Y., and Chen, C. (2004). Microcrack nucleation and its effect on the plastic deformation of FL  $\gamma$ -TiAl alloy. *Journal of materials science*, 39(5) :1721–1725.
- [Zset-Software, 1996] Zset-Software (1996). <http://www.zset-software.com>.



## **Modélisation multi-échelles du comportement mécanique des alliages TiAl pour la prévision de leur tenue en fatigue**

**Résumé :** Les alliages à base d'aluminures de titane (TiAl) sont des matériaux légers introduits dans la dernière génération de turboréacteurs pour l'aéronautique civile sous la forme d'aube de turbine basse pression. Ces alliages disposent notamment d'excellentes propriétés mécaniques à haute température et d'une résistance spécifique élevée. Leur utilisation reste cependant délicate du fait de leur faible ductilité et ténacité à température ambiante. Afin de trouver de nouvelles applications à ces matériaux, les deux principaux défis pour les futures générations d'alliage sont l'augmentation de la température d'utilisation et l'amélioration des propriétés en fatigue thermo-mécanique. Dans cette optique, le présent travail consiste à établir un lien entre la microstructure des alliages TiAl et leur tenue en fatigue. Pour cela, des travaux expérimentaux et numériques sont réalisés à différentes échelles d'intérêt sur les quatre microstructures dites génériques de ces matériaux. Dans un premier volet expérimental, un lien entre microstructure et comportement mécanique cyclique est établi via la réalisation d'essais mécaniques à l'échelle macroscopique (i.e. réponse contrainte-déformation), et d'essais micromécaniques qui permettent d'étudier la répartition de la déformation dans la microstructure. Dans un deuxième volet numérique, un modèle de plasticité cristalline permettant de tenir compte des spécificités des microstructures à structure lamellaire des alliages TiAl est défini. Les comportements mécaniques cycliques des quatre microstructures génériques sont ensuite modélisés via la réalisation de calculs éléments finis sur microstructures virtuelles et homogénéisation numérique. Enfin, cette modélisation est utilisée afin de réaliser une analyse aux Indicateurs de Tenue en Fatigue (ITF). Cette analyse permet de comparer les tenues en fatigue des différentes microstructures et d'identifier les éléments microstructuraux qui pilotent la durée de vie en fatigue pour différents régimes de sollicitation. Les résultats obtenus permettent alors d'effectuer un retour vers la métallurgie en indiquant les zones à renforcer pour améliorer les propriétés en fatigue de futurs alliages.

### **Multiscale modeling of TiAl alloys: mechanical behavior and microstructure-sensitive fatigue analysis**

**Abstract:** Technological advances in aircraft engine design require the use of lightweight materials at increasingly high temperatures. Therefore, intermetallics titanium aluminide alloys based on  $\gamma$ -TiAl have been introduced in the most recent civil turbo-engines as low pressure turbine blades. To extend the use of this material to other application technologies, new alloys are being developed with enhanced mechanical properties. Particularly, material development teams focus on increasing the working temperature and the fatigue strength. The aim of this work is to study the link between TiAl alloys microstructures and their fatigue strengths. Both experimental and numerical aspects are studied at various scales of interest. To begin with, the cyclic deformation of TiAl generic microstructures is studied experimentally by performing standard testing (i.e. stress-strain response) and micro-scale testing. Then, a crystal plasticity model that can be used to take into account the specific behavior of lamellar colonies is defined. The mechanical behavior of TiAl alloys is thereafter modeled by means of finite element computation on statistically representative microstructures and computational homogenization. Lastly, a Fatigue Indicator Parameters (FIP) analysis is performed to identify the various fatigue hot spot within TiAl microstructures. The results are used to suggest microstructure designs that could improve the fatigue strength of TiAl alloys next generation.