

THÈSE

ASPECTS MÉCANIQUES DU CHANGEMENT DE PHASE ALLOTROPIQUE À L'ÉCHELLE MÉSCOPIQUE

Présentée devant
l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon

pour obtenir
le GRADE DE DOCTEUR

École doctorale :
Mécanique, énergétique, Génie Civil, Acoustique

Spécialité :
MÉCANIQUE - GÉNIE MÉCANIQUE - GÉNIE CIVIL

par
Stéphane VALANCE
Agrégé de Mécanique

Thèse soutenue le 13 décembre 2007 devant la Commission d'examen

Jury

JULLIEN JEAN-FRANÇOIS	Professeur	Président du jury
FOREST SAMUEL	Professeur	Rapporteur
MOËS NICOLAS	Professeur	Rapporteur
GILLES PHILIPPE	Expert international AREVA	Examineur
DE BORST RENÉ	Professeur	Directeur de thèse
CORET MICHEL	Maitre de conférence	Examineur
RÉTHORÉ JULIEN	Chargé de recherche	Invité

LaMCoS - INSA de Lyon - CNRS UMRS5259
20, avenue Albert Einstein, 69621 Villeurbanne Cedex (FRANCE)

Résumé

La prédiction de l'état mécanique de structures en acier soumises à des chargements thermiques ne peut se faire sans modélisation du phénomène de changement de phase allotropique. En effet, le changement de phase induit, pour les aciers, un mécanisme appelé plasticité de transformation conduisant à une déformation irréversible pour des chargements inférieurs à la limite élastique des phases. De nombreux modèles analytiques ont proposé une approche homogénéisée pour la prédiction de l'état mécanique. Mais, pour des chargements complexes, ces modèles se révèlent inadéquates.

Prenant acte de ces lacunes, nous présentons une modélisation plus proche de sa description heuristique. L'échelle mésoscopique retenue pour ce travail est de l'ordre de la taille de grain. A cette échelle, nous considérons le comportement de chaque phase comme homogène au sens de la mécanique des milieux continus, par contre, le front de changement de phase est modélisé explicitement.

Cette approche mésoscopique du phénomène s'est faite expérimentalement et numériquement. Expérimentalement, nous avons mis au point et utilisé une manipulation permettant la traction et le chauffage sous vide partiel d'une éprouvette. L'acquisition de la surface de l'échantillon pendant la transformation martensitique a conduit, sous certaines hypothèses et grâce à la corrélation numérique d'image, à l'identification partielle des zones affectées localement par la transformation.

Numériquement, l'utilisation de la méthode des éléments finis étendus appliquée à des champs de déplacement faiblement discontinus. L'utilisation de cette méthode nécessite la modélisation du support de discontinuité -le front. Pour cela, en s'aidant de la méthode level set, nous avons créé des schémas numériques éléments finis permettant la représentation du support et sa propagation. En sus, nous nous sommes intéressés au calcul des forces motrices définies sur le front à partir du tenseur d'Eshelby et représentatives de sa vitesse locale.

Mots clés : changement de phase allotropique, plasticité de transformation (TRIP), méthode des éléments finis étendue (X-FEM), méthode Level set

Abstract

The prediction of the mechanical state of steel structures submit to thermo-mechanical loading must take into account consequences of allotropic phase change. Indeed, phase change induce, at least for steels, a mechanism of TRansformation Induced Plasticity (TRIP) leading to irreversible deformation even for loading less than elastic yield limit. Homogeneized analytical models generally fail to achieve a correct prediction for complex loading.

In order to overcome these difficulties, we present a model achieving a sharper description of the phenomenon. The mesoscopic working scale we adopt here is the grain scale size. Hence, we consider that the behaviour of each phase is homogenous in the sense of continuous media mechanic, whereas the front is explicitly described. We work both experimentally and numerically.

Experimentally, we designed a test facility enabling thermo mechanical loading of the sample under partial vacuum. Acquisition of sample surface while martensitic transformation is happening leads, under some hypothesis and thanks to Digital Image Correlation, to the partial identification of area affected by transformation.

Numerically, the eXtended Finite Element Method is applied for weakly discontinuous displacement fields. Used of this method needs to numerically track the transformation front -discontinuity support. In that goal, based on level set method, we develop FEM numerical scheme enabling recognition and propagation of discontinuity support. Finally, this work is complete by an approach of driving forces introduced through Eshelbian mechanics which are dual of front velocity.

Keywords : allotropic phase change, TRansformation Induced Plasticity, eXtended Finite Element Method (X-FEM), Level set method

Table des matières

Résumé	i
Abstract	iii
Table des matières	v
Table des figures	vii
1 Description mécanique d'un changement de phase allotropique	1
1.1 Introduction	2
1.2 Changement de phase dans les matériaux cristallins	2
1.2.1 Mouvement atomique	2
1.2.2 Métallurgie des aciers	5
1.2.3 Mécanisme de plasticité de transformation	7
1.3 Mécanique des milieux continus appliquée aux changement de phase	9
1.3.1 Implications générales d'un front de discontinuité	9
1.3.2 Equations d'équilibre classique	11
1.3.3 Equilibre matériel et forces motrices	13
1.4 Simulation mécanique d'un acier subissant un changement de phase	16
1.4.1 Modèles existants	16
1.4.2 Travail envisagé	18
2 Caractérisation expérimentale de changement de phase	19
2.1 Objectif, matériau, microstructure	20
2.1.1 Observations envisagées	20
2.1.2 Matériau testé	20
2.2 Dispositif expérimental	21
2.2.1 Analyse fonctionnelle des besoins	21
2.2.2 Description fonctionnelle	22
2.3 Observations	27
2.3.1 Analyse macroscopique d'un essai	28
2.3.2 Analyse mésoscopique d'un essai	30
2.4 Conclusions - perspectives	37

3	Comportement intrinsèque des phases	39
3.1	Éléments de théorie plastique	40
3.2	Discrétisation de la théorie plastique	42
3.3	Association du chargement thermique au changement de densité	46
3.4	Conclusion	46
4	Discrétisation du problème de changement de phase	49
4.1	Modélisation numérique de discontinuités	51
4.1.1	Modélisation numérique de champs discontinus	51
4.1.2	Modélisation des surface de discontinuité : méthode level-set	53
4.2	Méthode level set discrétisée par éléments finis	55
4.2.1	Initialisation à partir d'une image numérique	56
4.2.2	Initialisation du champ level set à norme de gradient constante	56
4.2.3	Relier l'étape d'initialisation à la propagation du front	58
4.2.4	Algorithme global	59
4.2.5	Illustration	59
4.3	Problème mécanique à l'interface	63
4.4	Exemple de propagation : changement de phase diffusif dans le 16MND5	65
4.4.1	Caractéristiques de la simulation	65
4.4.2	Evolution de la contrainte et du déplacement	67
4.5	Conclusions-perspectives	67
5	Force motrice sur le front	71
5.1	Intégrale indépendante du contour	72
5.2	Repérage sur le front	73
5.2.1	Champ orthogonal	73
5.2.2	Contour fermé	74
5.2.3	Exemples pour des contours simples	74
5.3	Application numérique de l'intégrale indépendante du contour	75
5.3.1	Discrétisation du front	75
5.3.2	Champ d'extension virtuel	76
5.3.3	Résolution numérique	77
5.4	Exemple de calcul de force motrice par intégrale indépendante	77
5.4.1	Choix de la discrétisation du front	77
5.4.2	Choix du paramétrage du champ d'extension	78
5.4.3	Evolution de la force motrice lors du chargement pour l'essai Satoh	80
5.5	Conclusions-perspectives	81
	Conclusions - perspectives	85
A	Simulation de l'état mécanique homogénéisé	87
	Bibliographie	103

Table des figures

1.1	Mouvements atomiques pour le mécanisme de diffusion.	3
1.2	Mécanisme de Bain : mailles c.f.c. adjacentes.	4
1.3	Transformation au cours d'un cycle chauffage-refroidissement.	4
1.4	Diagramme de phase fer-carbone.	5
1.5	Diagramme TTT d'un acier.	6
1.6	Dilatométrie libre et contrainte pendant un changement de phase.	8
1.7	Correspondance entre les configurations.	9
1.8	Milieu continu en présence d'un front de discontinuité.	11
2.1	Macrographies de la surface attaquée de marval X12.	21
2.2	Traitements thermiques.	21
2.3	Diagramme pieuvre pour l'analyse fonctionnelle.	22
2.4	Dessin de définition de l'éprouvette.	23
2.5	Formation et délitement du film de corrosion à haute température.	23
2.6	Vue CAO du boîtier, éprouvette et actionneur piézoélectrique.	24
2.7	Actionneur piézo-électrique.	24
2.8	Schématisation de l'implantation des composants.	25
2.9	Appliquer un chargement thermique.	26
2.10	Thermocouple gainé pour la mesure de température.	26
2.11	Capteur d'effort.	27
2.12	Boîtier d'observation.	27
2.13	Vue panoramique du banc d'essais.	28
2.14	Evolution de la température au cours de l'essai.	28
2.15	Déformation nominale.	29
2.16	Fraction de phase transformée et déformation nominale.	29
2.17	Zone d'intérêt pour la corrélation.	30
2.18	Champ de déplacement pendant le changement de phase martensitique.	32
2.19	Champ de déplacement pendant le changement de phase martensitique.	33
2.20	Typologie des évolutions de ϵ_N au cours du temps.	34
2.21	Typologie d'évolution : quelques exemples.	34
2.22	Comparaison entre les fractions de phase transformée.	35
2.23	Champ H_e^{120} pendant le changement de phase martensitique.	36
3.1	Schématisation de l'algorithme de retour radial.	45
3.2	Coefficients de dilatation pour une transformation de la phase γ vers la phase α	47

4.1	Éléments enrichis, Ω^ϕ , autour de l'interface ϕ^0	52
4.2	Stratégies de sous-découpage.	53
4.3	Hypersurface level set.	54
4.4	Noms des sous domaines du maillage autour de l'iso-0 ϕ^0	58
4.5	Caractéristiques initiales pour l'étude d'erreur.	60
4.6	Erreur à l'initialisation mesurée avec le critère e_ϕ	61
4.7	Erreur à la distance signée mesurée avec le critère e_∇	61
4.8	Erreur lors des étapes de propagation mesurée avec le critère e_ϕ	61
4.9	Image d'initialisation pour l'étude qualitative.	62
4.10	Interaction de contours circulaires, fonctions de forme du premier ordre.	62
4.11	Interaction de contours circulaires, fonctions de forme du deuxième ordre.	63
4.12	Enrichissement $\tilde{\phi}$ pour un contour linéaire.	65
4.13	Enrichissement $\tilde{\phi}$ pour un contour circulaire.	66
4.14	Géométrie et conditions aux limites pour le cas simulé.	66
4.15	Variation de la température lors du changement de phase austénitique.	67
4.16	Evolution de la norme du champ de déplacement sur le maillage déformé.	68
4.17	Evolution de la contrainte de von Mises.	69
5.1	Domaine d'intégration pour l'intégrale indépendante du contour.	72
5.2	Champ orthogonal ψ pour un support linéaire.	75
5.3	Champ orthogonal ψ pour un support circulaire (fig. 4.13(a)) avec enrichissement.	75
5.4	Définition des fonctions de forme et du champ d'extension virtuel.	76
5.5	Domaine pour le calcul de saut par intégrale indépendante.	77
5.6	Calcul du saut : front discrétisé à finesse égale avec le maillage.	78
5.7	Calcul du saut : influence de la discrétisation du front.	79
5.8	Essai Satoh pour le calcul de force motrice pour un chargement thermo-mécanique.	79
5.9	Composante b_{xx} du tenseur d'Eshelby.	79
5.10	Composante normale du saut du tenseur d'Eshelby en fonction du paramètre r_0	80
5.11	Evolution de la force motrice au fur et à mesure du chargement en température.	81
5.12	Evolution des champs b_{xx} et σ_{vm} avant plastification.	82
5.13	Evolution des champs b_{xx} et σ_{vm} après plastification.	83

Chapitre 1

Description mécanique d'un changement de phase allotropique

Un changement de phase allotropique peut être analysé et modélisé suivant différentes échelles. Dans cette optique, nous décrirons les caractéristiques d'un changement de phase dans les aciers ainsi que ses conséquences mécaniques. Ensuite, nous exposerons le cadre de la mécanique des milieux continus correspondant à un milieu contenant une discontinuité de densité. Enfin, nous aborderons la place du travail proposé par rapport aux techniques de simulation existantes.

Sommaire

1.1	Introduction	2
1.2	Changement de phase dans les matériaux cristallins	2
1.2.1	Mouvement atomique	2
1.2.2	Métallurgie des aciers	5
1.2.3	Mécanisme de plasticité de transformation	7
1.3	Mécanique des milieux continus appliquée aux changement de phase	9
1.3.1	Implications générales d'un front de discontinuité	9
1.3.2	Equations d'équilibre classique	11
1.3.3	Equilibre matériel et forces motrices	13
1.4	Simulation mécanique d'un acier subissant un changement de phase	16
1.4.1	Modèles existants	16
1.4.2	Travail envisagé	18

1.1 Introduction

La prédiction de l'état mécanique de structures en acier soumises à des chargements thermiques ne peut se faire sans modélisation du phénomène de changement de phase allotropique. En effet, le changement de phase induit dans les aciers un mécanisme appelé plasticité de transformation conduisant à une déformation irréversible pour des chargements inférieurs à la limite élastique de chacune des phases. Ce mécanisme remet en cause tout le dimensionnement de la structure. De nombreux modèles analytiques ont proposé une approche homogénéisée pour la mécanique pour prévoir l'état mécanique pendant le changement de phase. Ces modèles sont alors utilisés en conjonction avec des simulations éléments finis. Cependant, il a été montré par Coret [COR 02] que pour des chargements complexes, ces modèles se révèlent inadéquates tant ils conduisent à une erreur importante entre l'état mécanique réel et la prédiction.

Prenant acte de ces lacunes, nous avons décidé de conduire une étude sur le mécanisme incluant une modélisation plus proche de sa description heuristique.

Les changements de phases allotropiques correspondent à un réarrangement du réseau cristallin d'un matériau lorsqu'il est sollicité thermiquement, voire mécaniquement. Ce changement de phase peut-être vu à plusieurs échelles, du niveau atomique -échelle microscopique- jusqu'à un niveau homogénéisé -échelle macroscopique. Ces différentes vues sont détaillées dans la première partie du mémoire. Nous avons en outre dans cette première partie réalisé une étude bibliographique des conséquences, dans le cadre de la mécanique des milieux continus, de la présence d'un front de changement de phase. Par ailleurs nous présentons les résultats de la mécanique Eshelbienne ayant trait au changement de phase allotropique, et permettant la définition d'une force motrice duale de la vitesse du front.

L'échelle retenue pour ce travail est de l'ordre de la taille de grain -échelle mésoscopique. A cette échelle, nous considérons le comportement de chaque phase prise isolément comme homogène au sens de la mécanique des milieux continus, par contre, les phases ne sont pas homogénéisées entre elles, de sorte que le front de changement de phase est pris en compte.

Cette approche mésoscopique du phénomène s'est faite suivant deux voies, expérimentale et numérique. Ce chapitre est donc intimement liés aux moyens d'investigation expérimentaux et numériques du changement de phase allotropique dans les aciers.

1.2 Changement de phase dans les matériaux cristallins

Un changement de phase allotropique prend place au sein d'un réseau cristallin. Il se définit comme le passage d'un arrangement du réseau cristallin à un autre. Il induit la présence de deux phases, appelées phases mère et fille et d'une interface entre ces phases, le front de transformation.

Cette transformation peut-être décrite à l'échelle atomique, mais aussi *via* ses conséquences macroscopiques, tant du point de vue des caractéristiques matériau avant et après transformation, que des conséquences mécaniques homogénéisées du changement de phase lui-même.

1.2.1 Mouvement atomique

Le changement de phase se produit lors de la sollicitation thermique et/ou mécanique du matériau. Dans les deux cas, c'est la variation de distance inter-atomique induite par le chargement thermo-mécanique qui conduit la structure cristalline à se réarranger en vue d'obtenir une forme

plus stable. Ce réarrangement peut se produire suivant 2 mécanismes, diffusif ou displacif, en fonction des contraintes externes et de la texture initiale du réseau.

Transformation diffusive

La figure 1.1 présente plusieurs mouvements possibles de diffusion d’atomes [GUI] au sein d’un réseau cristallin. De prime abord, le mouvement de diffusion interstitiel ne concerne pas la transformation allotropique. Concernant les mécanismes d’échange, l’énergie nécessaire, supposant la possibilité de déformer localement le réseau, est trop importante pour qu’ils soient envisageables.

Finalement, la transformation allotropique diffusif est reliée au mécanisme de diffusion lacunaire. Ce mécanisme se définit comme des mouvements d’atomes de faible amplitude dans des lacunes du réseau conduisant à son réarrangement. La diffusion ne peut se produire que s’il existe une lacune au voisinage immédiat de l’atome qui doit migrer. De plus, l’atome migrant doit posséder une énergie suffisante pour quitter sa position d’équilibre.

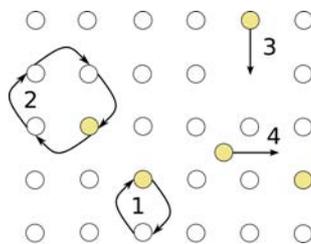


FIG. 1.1 – Mouvements atomiques possibles pour le mécanisme de diffusion. 1, échange direct, 2, échange cyclique, 3, mécanisme lacunaire, 4, mécanisme interstitiel.

D’un point de vue cinétique, la transformation diffusif est identifiée comme fonctionnant par germination et croissance. Au voisinage de défauts du réseau apparaissent des germes initiaux cohérents avec la matrice. Ensuite, ces germes croissent et coalescent lorsqu’ils se rencontrent.

Le mécanisme de transformation diffusif est un mécanisme lent. Ainsi, pour certaines transformations au refroidissement suffisamment rapides dans les métaux, le mécanisme diffusif n’a pas le temps de se produire. Apparaît alors une phase méta-stable obtenue par une transformation dite displacive.

Transformation displacive

Le mécanisme de transformation displacif est expliqué par Bain pour le passage d’un réseau c.f.c. -cubique face centré- à un réseau c.c. -cubique centré-, comme le montre la figure 1.2. Sur une maille élémentaire du réseau c.f.c., l’application d’une déformation de compression suivant Z et d’une déformation de traction suivant X et Y permet de retrouver une maille élémentaire non déformée du réseau c.c. Cette transformation n’induit aucun mécanisme de diffusion des atomes.

D’un point de vue cinétique, cette transformation se traduit par la propagation d’une onde de cisaillement dans le métal. La célérité de cette onde est celle du son dans le milieu. La transformation métallique associée à ce mécanisme est la transformation martensitique. Cette transformation allotropique peut en outre être activée mécaniquement par l’application d’une contrainte externe, typiquement pour un métal ayant une phase austénitique stable à basse température. Cette propriété est utilisée dans les alliages à mémoire de forme.

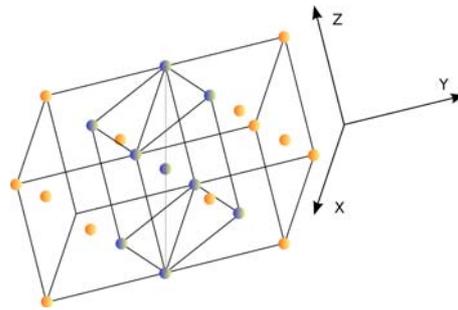


FIG. 1.2 – Mécanisme de Bain : deux mailles élémentaires adjacentes pour un réseau cubique face centrée. Au centre, la maille élémentaire déformée cubique centrée.

Parenté atomique - interface

Le cycle de transformation auquel nous nous intéresserons dans ce mémoire est représenté, pour les mouvements atomiques, sur la figure 1.3. Pour une transformation displacive, il existe une relation de correspondance entre phase mère et phase fille. Transformations diffusive et displacive diffèrent fondamentalement par la conservation ou non des voisins atomiques initiaux. Cette propriété est importante dans le sens où la transformation martensitique peut être associée à la conservation des défauts d'arrangement cristallin, en particulier les dislocations.

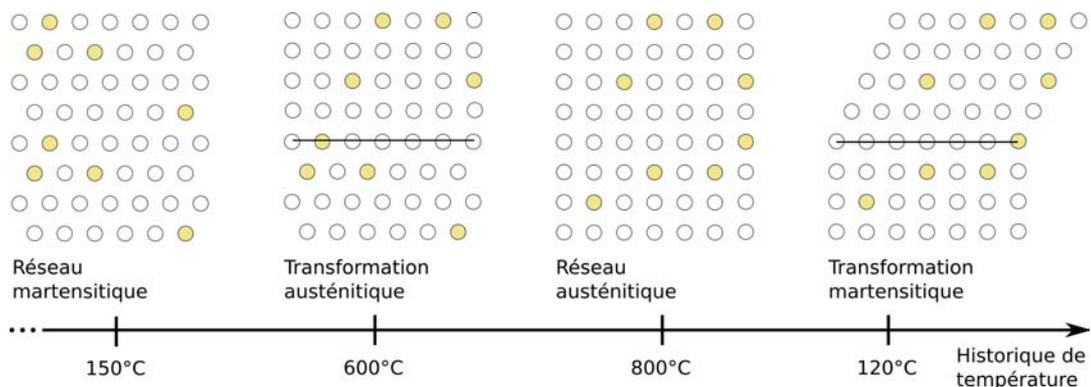


FIG. 1.3 – Transformation au cours d'un cycle de chauffage-refroidissement dans un acier.

L'interface entre les deux phases peut-être de nature cohérente ou incohérente [BHA]. Dans le cas d'une interface cohérente, les phases adjacentes ont des plans cristallographiques dont les directions coïncident. Dans le second cas, le réseau cristallin n'est pas continu au franchissement de l'interface.

Entre ces cas extrêmes, le cas -réel- d'interface semi-cohérente présente périodiquement des dislocations à l'interface, qui est cohérente entre ces dislocations.

La nature de l'interface conditionne, pour la mécanique, les propriétés locales du champ de déplacement sur le support du front. Nous considérerons, pour notre part, qu'une interface cohérente assure la continuité -d'ordre au moins C^0 - du champ de déplacement au franchissement du front.

1.2.2 Métallurgie des aciers

Phases des aciers et condition d'obtention

Historiquement, les propriétés de changement de phase des aciers ont été utilisées bien avant leur explication à l'échelle atomique [AGR 92]. L'étude macroscopique systématique de la relation entre traitement thermique et propriétés mécaniques définit la métallurgie.

En dehors des propriétés mécaniques, ce type d'étude fait usage de macrographies d'échantillons attaqués. L'attaque des échantillons par une solution, la plus souvent acide, permet de révéler la structure granulaire du métal attaqué. Quelques-unes des phases identifiées par ce biais sont détaillées dans le tableau 1.1.

Phase	Composition	Structure	Symbole
Fer δ	Fe	cubique centré	δ
Austénite	Fe	cubique face centrée	γ
Martensite	Fe	cubique centré	
Ferrite	Fe	cubique centré	α
Cémentite	Fe_3C	orthorhombique	

TAB. 1.1 – Phases stables dans les aciers.

Les domaines d'existence en fonction de la concentration en carbone et de la température sont schématisés sur la figure 1.4. Sur cette figure seuls sont représentés les domaines d'existence stables. Pour cette raison, la martensite -phase métastable- n'est pas présente dans ce diagramme.

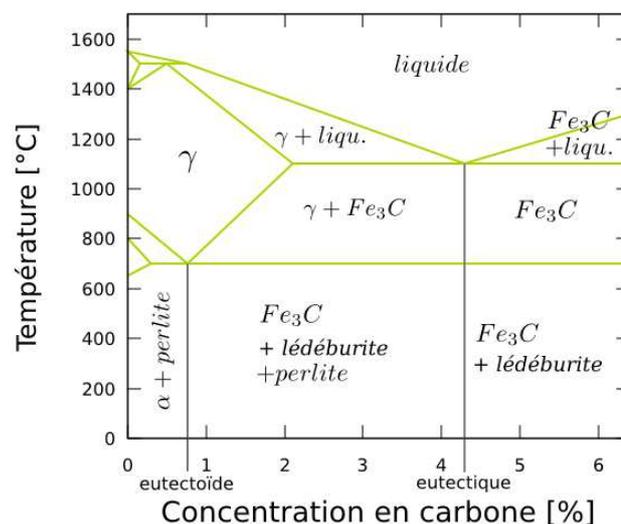


FIG. 1.4 – Diagramme de phase fer-carbone.

En sus du diagramme de phase 1.4, la figure 1.5 présente un diagramme TTT (Temps Température Transformation) qui indique, après austénitisation, et en fonction du temps de refroidissement, les différentes phases obtenues. La vitesse de refroidissement, conditionne l'obtention soit de la perlite, soit de la bainite, soit de la martensite :

1. Description mécanique d'un changement de phase allotropique

- **perlite**, composé de ferrite et cémentite. La cémentite contient la quasi-totalité du carbone présent dans l'acier. Cette transformation se fait par diffusion à courte distance.
- **bainite**, cristaux de ferrite sursaturés en carbone et cristaux de cémentite. Le mécanisme de transformation fait intervenir uniquement la diffusion du carbone.
- **martensite**, transformation rapide, sans diffusion.

Sur le diagramme TTT, la phase méta-stable martensitique apparaît. Il est évident sur un tel diagramme que la température M_s est critique au sens où elle conditionne le type de transformation au refroidissement -diffusive ou displacive.

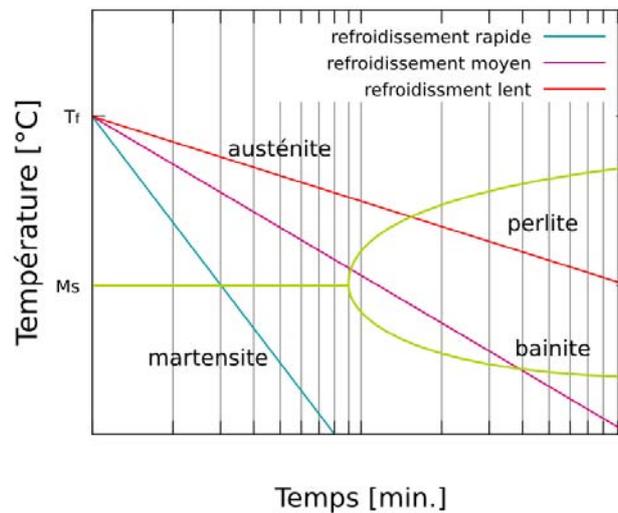


FIG. 1.5 – Diagramme TTT d'un acier.

Enfin, les aciers peuvent être distingués suivant leur teneur en carbone :

- eutectoïde : $\%C = 0.76$
- hypoeutectoïde : $\%C < 0.76$
- hypereutectoïde : $\%C > 0.76$

La teneur eutectoïde se retrouve sur le diagramme de phase 1.4. Elle caractérise la possibilité, ou l'impossibilité, d'existence d'une phase dans un acier particulier.

Etude par dilatomètre libre

L'utilisation de macrographies ne permet d'obtenir qu'une vision statique des phases obtenues. Ce type d'étude peut-être complétée par l'utilisation de dilatométrie libre macroscopique. Cet outil d'investigation expérimental passe par la mesure de l'allongement d'un échantillon libre de contraintes extérieures autres que la température.

La figure 1.6(a), montre une courbe de dilatométrie libre pour un acier de type 16MND5. La partie au chauffage montre qu'un changement de phase a lieu vers $700^{\circ}C$, tandis que la partie au refroidissement montre un changement de phase commençant vers $400^{\circ}C$. L'identification du changement de phase se réalise en identifiant la perte de linéarité de la déformation en fonction de la température.

Ce type de courbe permet en outre d'obtenir la fraction de phase transformée lors du changement de phase, comme l'a montré Leblond [LEB 86a]. Tout d'abord, la déformation totale moyenne peut-être partitionnée suivant les différentes contributions :

$$E^t = E^e + E^{th} + E^p \quad (1.1)$$

E représente la déformation moyenne sur un volume d'homogénéisation, les exposants t , e , th et p s'associent respectivement à la déformation moyenne totale, élastique, thermique et plastique.

En tenant compte de la possibilité d'existence de différentes phases, par exemple pour une transformation d'une phase austénitique γ à une phase ferritique α , la déformation thermique moyenne est décrite par :

$$E^{th} = (1 - z_\gamma)E_\alpha^{th} + z_\gamma(E_\gamma^{th} + \Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{T_0}) \quad (1.2)$$

où l'indice indique la phase sur laquelle la moyenne est réalisée, et $\Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{T_0}$ est la différence de capacité de la phase α par rapport à la phase γ à la température T_0 .

Pour une expérience de dilatométrie libre, la déformation totale E^t est égale à la déformation thermique E^{th} . De plus, la déformation thermique moyenne E^{th} entre les températures T_0 et T , s'écrit $k_\kappa(T - T_0)$, pour une phase κ de coefficient de dilatation k_κ . La relation précédente prend alors la forme :

$$z_\gamma = \frac{E^{th} - k_\alpha(T - T_0) - \Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{T_0}}{(k_\gamma - k_\alpha)(T - T_0) - \Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{T_0}} \quad (1.3)$$

Une expérience de dilatométrie libre permet ainsi d'obtenir la proportion de phase transformée. Cependant elle ne donne aucune information sur la localisation des phases. Par contre, la connaissance de la proportion de phase permet d'obtenir la vitesse normale moyenne du front de changement de phase. Par définition, le taux de phase κ transformée, z_κ s'écrit :

$$\dot{z}_\kappa = \frac{1}{\text{mes}(\Omega)} \frac{d}{dt} \int_{\Omega_\kappa} dV \quad (1.4)$$

avec Ω_κ le domaine occupé par la phase κ , et $\text{mes}(\Omega)$ le volume total du domaine considéré.

L'application du théorème de la divergence nous permet de réécrire le terme intégral, et d'obtenir finalement la relation :

$$\dot{z}_\kappa = \frac{1}{V} \int_{\Sigma_\kappa} F \, dS \quad (1.5)$$

où F désigne la vitesse normale du front de changement de phase et Σ_κ la frontière du domaine Ω_κ .

L'intérêt de cette relation est de relier la moyenne d'une quantité locale à une variation globale.

1.2.3 Mécanisme de plasticité de transformation

Constat expérimental

Mis en évidence la première fois par Fischer, le mécanisme de plasticité de transformation se caractérise par l'obtention de déformation plastique d'un métal lorsqu'une contrainte, inférieure à la limite élastique, est appliquée pendant le changement de phase. La figure 1.6 montre ainsi la déformation axiale mesurée sur une éprouvette de traction en acier 16MND5 en dilatométrie libre et en dilatométrie contrainte pendant le changement de phase. L'application d'une contrainte au refroidissement pendant le changement de phase martensitique induit une déformation résiduelle appelée déformation plastique de transformation.

1. Description mécanique d'un changement de phase allotropique

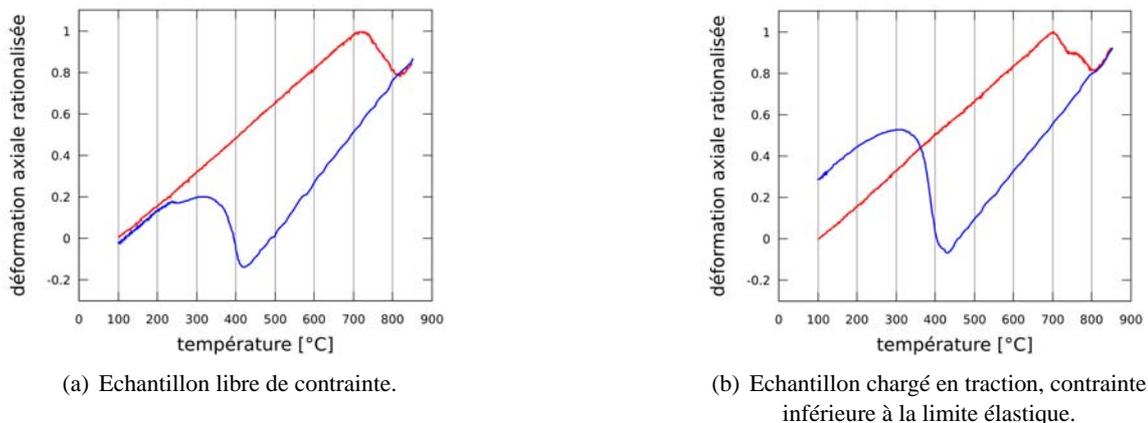


FIG. 1.6 – Déformation longitudinale rationalisée lors d'un cycle chauffage-refroidissement.

Explication heuristique

Deux théories heuristiques expliquent le phénomène de plasticité de transformation. La première, déterminée par Greenwood et Johnson [GRE 65], a trait au mécanisme d'accommodation plastique. La différence de compacité entre les phases mère et fille entraîne localement un état de contrainte élevé conduisant à la plastification du matériau. Cependant, à l'échelle macroscopique, cette déformation irréversible n'est pas sensible. Par contre, l'ajout d'une contrainte externe macroscopique lors du changement de phase permet d'orienter localement l'écoulement plastique et ainsi de provoquer une déformation plastique macroscopiquement visible.

Lorsque plusieurs variantes de la phase fille existent, le phénomène peut s'expliquer par la formation de variantes à orientation préférentielle, c'est le mécanisme de Magee[MAG 70, MAG 66]. Pour les aciers, il est admis que seule la transformation martensitique est concernée par ce mécanisme.

L'une des caractéristiques essentielle à souligner pour la plasticité de transformation est sa nature irréversible. En particulier pour mettre en place une simulation correcte du phénomène, il est nécessaire de prendre en compte tout le trajet de chargement, et plus précisément toute l'évolution de l'interface, ou, *a minima*, la variation de quantité de phase.

Conséquences industrielles

Le phénomène de plasticité de transformation donne un sens pratique à l'étude de l'état mécanique de l'acier durant un changement de phase. En effet, la possibilité de plastification pendant le changement de phase pour une contrainte inférieure à la limite élastique remet en cause le dimensionnement de structures soumises à des changements de phases durant leur cycle de vie.

Ainsi pour les cuves de réacteur nucléaire. En cas d'incident mineur, ces cuves peuvent être soumises à des températures induisant un changement de phase. Le bridage de ces cuves sur leur partie supérieure en association avec le chargement thermique accidentel induit un état de contrainte pouvant conduire à l'apparition de plasticité de transformation. Cette plasticité de transformation peut avoir des conséquences sur la durée de vie restante de la cuve, même si elle ne semble pas avoir subi de préjudice apparent.

L'impact de ce phénomène s'étend aussi au cas des structures assemblées par soudage. Bien

que beaucoup d'autres paramètres influencent l'état mécanique final d'un acier soumis à un opération de soudage, il est certain que le bridage des pièces durant les opérations en association avec le chargement thermique sur la zone affectée thermiquement entraîne une déformation plastique susceptible de modifier la géométrie finale de la structure soudée. Dans ce contexte, une modélisation fiable de l'état de déformation résultant de la plasticité de transformation amènerait une meilleure estimation de la géométrie finale.

1.3 Mécanique des milieux continus appliquée aux changements de phase allotropiques

La théorie des milieux continus est généralement développée pour des champs de déplacement au minimum C^1 sur le milieu. Pendant un changement de phase allotropique, le milieu est séparé en deux sous domaines de densité et de propriétés matérielles différentes. En conséquence, le champ de déplacement est faiblement discontinu à l'interface entre ces deux sous domaines. Ces propriétés ne sont pas rédhibitoire pour la modélisation dans le cadre des milieux continus, mais nécessitent une prise en compte.

1.3.1 Implications générales d'un front de discontinuité

Description géométrique

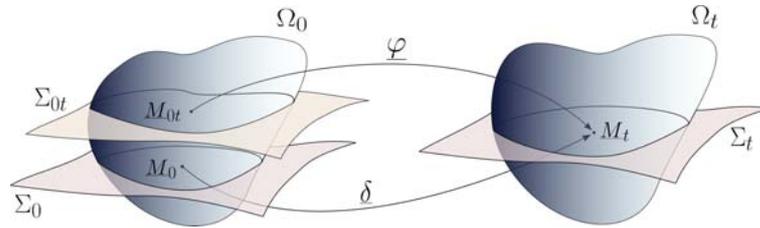


FIG. 1.7 – Correspondance entre les configurations de la position de la surface de discontinuité.

Soit un milieu continu Ω constitué de deux matériaux différents. Ces deux matériaux sont séparés à l'instant t par une frontière Σ_t . Cette interface évolue sur la configuration κ_t . La position de l'interface sur la configuration κ_0 à l'instant initial est dénotée Σ_0 . La nouvelle position de l'interface Σ_t dans la configuration κ_t peut être déterminée à partir de Σ_0 via un homéomorphisme défini sur la configuration de référence exprimant le transport géométrique, $\underline{\delta}(\underline{X}_0, t)$. La vitesse de propagation du front \underline{W} est ainsi définie par :

$$\underline{W}(\underline{x}, t) = \frac{\partial \underline{\delta}(\underline{X}_0, t)}{\partial t} \quad (1.6)$$

\underline{X}_0 est le vecteur position du point courant \underline{M}_0 de Σ_0 ;

Cette vitesse de propagation est, par nature, orthogonale au front lui même, de sorte que :

$$\underline{W} = \underline{W} \underline{N}_t \quad (1.7)$$

où \underline{N}_t est la normale au front dans la configuration κ_t , définie sur la figure 1.8

Par ailleurs, nous pouvons définir la position de l'interface sur la configuration de référence à l'instant t , Σ_{0t} , représentée schématiquement sur la figure 1.7. Un point \underline{M} de Σ_t peut ainsi être repéré à la fois par $\underline{x} = \delta(\underline{X}_0, t)$ et $\underline{x} = \varphi(\underline{X}_{0t}, t)$. Si la surface Σ_{0t} n'est pas fixe dans la configuration κ_0 , sa célérité par rapport à la matière est alors :

$$\underline{V} = (W - \underline{U}(\underline{x}, t) \cdot \underline{N}_t) \underline{N}_t \quad (1.8)$$

où \underline{U} est la vitesse de la particule \underline{x} sur la configuration κ_t .

Compatibilité géométrique - Hadamard

Pour intégrer le cadre de la mécanique des milieux continus, le champ de déplacement doit être au minimum C^0 sur le domaine de définition. Pour respecter cette condition, les champs de déformation et de vitesse dérivés de ce champ de déplacement doivent obéir à la condition de saut de Hadamard. Dans un cadre lagrangien, cette condition de compatibilité géométrique s'écrit :

$$V_0 \llbracket \underline{\nabla} \varphi(\underline{X}_{0t}, t) \rrbracket + \llbracket \underline{U} \rrbracket \otimes \underline{N}_{0t} = \underline{0} \quad (1.9)$$

où V_0 désigne la célérité de Σ sur la configuration κ_0 projetée sur la normale dans cette configuration.

De la relation précédente les formes nécessaires pour $\llbracket \underline{\nabla} \varphi(\underline{X}_{0t}, t) \rrbracket$ et $\llbracket \underline{U} \rrbracket$ sont :

$$\llbracket \underline{\nabla} \varphi(\underline{X}_{0t}, t) \rrbracket = \underline{\lambda} \otimes \underline{N}_{0t} \quad (1.10)$$

$$\llbracket \underline{U} \rrbracket = \underline{\lambda} V_0 \quad (1.11)$$

où $\underline{\lambda}$ est un vecteur arbitraire.

Cette relation peut être réécrite sous la forme :

$$V_0 = 0 \Rightarrow \llbracket \underline{U} \rrbracket = \underline{0} \quad (1.12)$$

Concrètement, une onde de discontinuité du champ de vitesse n'est possible que si la célérité de l'interface par rapport à la matière est non nulle.

Intégration sur des champs discontinus

Pour une quantité quelconque scalaire Γ , dépendante du temps et de l'espace, et subissant une discontinuité au passage de la surface Σ_t , lorsque l'interface est en mouvement, la dérivation par rapport au temps s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \Gamma(\underline{x}, t) dV = \int_{\Omega_t} \frac{\partial \Gamma(\underline{x}, t)}{\partial t} + V \nabla \cdot \Gamma(\underline{x}, t) dV + \int_{\Sigma_t} \llbracket \Gamma(\underline{x}, t) \otimes \underline{V} \rrbracket dS \quad (1.13)$$

La présence d'une discontinuité a de même des conséquences sur le théorème de la divergence :

$$\int_{\Omega_t} \nabla \cdot \Gamma(\underline{x}, t) dV + \int_{\Sigma_t} \llbracket \Gamma(\underline{x}, t) \rrbracket dS = \int_{\partial \Omega_t} \Gamma(\underline{x}, t) dS \quad (1.14)$$

La conséquence de la présence d'une discontinuité faible dans le milieu continu est ainsi l'apparition de termes de saut sur l'interface Σ_t . Ces termes de saut entraînent l'apparition d'équations d'équilibre sur le front développées par la suite.

1.3.2 Equations d'équilibre classique

Hypothèses constitutives

L'amplitude des déplacements mesurés macroscopiquement lors d'un changement de phase allotropique est suffisamment faible pour pouvoir adopter l'hypothèse des petites perturbations. Conséquemment, les configurations κ_0 et κ_t sont considérées confondues. Ainsi, pour la normale au front sera dénotée par : $\underline{N}_{0t} = \underline{N}_t = \underline{n}$. Les notations utilisées sont résumées sur la figure 1.8.

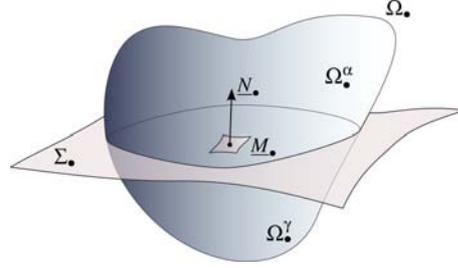


FIG. 1.8 – Milieu continu en présence d'une discontinuité faible Σ , notation utilisées pour la configuration κ .

Le modèle descriptif adopté ici considère que le changement de phase se fait sur un front d'épaisseur nulle. Pratiquement, l'épaisseur du front de changement de phase est de l'ordre de la distance inter-atomique pour le réseau considéré.

D'autre part, le modèle présenté suppose qu'il n'y a pas de défaut à l'interface -interface cohérente. Ainsi le champ de déplacement ne présente pas de saut à l'interface. La température est supposée être elle aussi continue à l'interface de changement de phase.

Les hypothèses ci-dessus semblent raisonnables au vu de l'échelle descriptive adoptée qui est supérieure à l'échelle atomique. L'interface de changement de phase représente alors le support du saut des propriétés matérielles et de densité.

Conservation de la masse

La masse du système dans le domaine Ω_t s'écrit :

$$\mathcal{M} = \int_{\Omega_t} \rho(\underline{x}, t) dV \quad (1.15)$$

Le système considéré étant fermé, la conservation de la masse se traduit par :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{M} &= 0 \iff \\ \int_{\Omega_t} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \underline{U}) \right) dV + \int_{\Sigma_t} \llbracket \rho \underline{V} \rrbracket \cdot \underline{n} dS &= 0 \end{aligned} \quad (1.16)$$

Localement, l'équation précédente donne :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \underline{U}) = 0 \text{ sur } \Omega_t \quad (1.17)$$

$$\llbracket \rho \underline{V} \rrbracket \cdot \underline{n} = 0 \text{ sur } \Sigma_t \quad (1.18)$$

L'équation 1.18 peut-être réécrite sous la forme :

$$\begin{aligned} \text{sur } \Sigma_t, \llbracket \rho \underline{V} \rrbracket \cdot \underline{n} &= 0 \iff \\ \llbracket \rho \underline{U} \rrbracket \cdot \underline{n} - \llbracket \rho \rrbracket \underline{W} \cdot \underline{n} &= 0 \end{aligned} \quad (1.19)$$

L'équation 1.19 utilisée en conjonction avec la condition de compatibilité géométrique ($(\underline{U}_\gamma - \underline{W}) \cdot \underline{n} \neq 0$ et $(\underline{U}_\alpha - \underline{W}) \cdot \underline{n} \neq 0$), montre qu'une discontinuité du champ de densité, caractéristique d'un changement de phase allotropique, implique une discontinuité normale du champ de vitesse.

Conservation de la quantité de mouvement

Pour déterminer les équations relatives à la conservation de la quantité de mouvement, nous nous appuyons sur le principe des puissances virtuelles. Pour un champ de vitesse virtuel $\hat{\underline{U}}$, le principe s'écrit :

$$\forall \hat{\underline{U}} \in \mathcal{E}_{ad}, \mathcal{A}(\hat{\underline{U}}) = \mathcal{P}_e(\hat{\underline{U}}) + \mathcal{P}_i(\hat{\underline{U}}) \quad (1.20)$$

$$\forall \hat{\underline{U}} \in \mathcal{E}_r, \mathcal{P}_i(\hat{\underline{U}}) = 0 \quad (1.21)$$

où \mathcal{A} , \mathcal{P}_e et \mathcal{P}_i désignent, respectivement, la puissance des quantités d'accélération, la puissances des efforts extérieurs et la puissance des efforts intérieurs. \mathcal{E}_{ad} est l'espace vectoriel des mouvements virtuels, \mathcal{E}_r est l'espace vectoriels des mouvements virtuels rigidifiant.

Il faut admettre ici que pour un champ de vitesse réel discontinu, l'espace \mathcal{E}_{ad} des champs de vitesse virtuel ne contient pas le mouvement réel, sans pour autant remettre en cause le principe des puissances virtuelles. Les champs de vitesse virtuels seront donc toujours considérés continus.

En présence de discontinuités faible du champ de déplacement, et pour des champs virtuels continus au franchissement des surfaces Σ_t , la puissance virtuelle des quantités d'accélération s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\hat{\underline{U}}) &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho \underline{U} \cdot \hat{\underline{U}} \, dV \iff \\ &= \int_{\Omega_t} \rho \frac{d\underline{U}}{dt} \cdot \hat{\underline{U}} \, dV + \int_{\Sigma_t} \rho \llbracket \underline{U} \rrbracket \cdot \hat{\underline{U}} \cdot \underline{V} \cdot \underline{n} \, dS \end{aligned} \quad (1.22)$$

Pour déterminer la puissance virtuelle des efforts intérieurs, nous admettons que ces derniers peuvent être modélisés par un tenseur d'ordre 2 symétrique. Soit $\underline{\underline{\sigma}}$ le tenseur de Cauchy. Ce tenseur est continu par morceau, et ses surfaces éventuelles de discontinuité confondues avec Σ_t . Alors l'expression de la puissance virtuelle des efforts intérieurs est :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_i(\hat{\underline{U}}) &= \int_{\Omega_t} -\underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\nabla}} \hat{\underline{U}} \, dV \iff \\ &= \int_{\Omega_t} \underline{\text{div}}(\underline{\underline{\sigma}}) \cdot \hat{\underline{U}} \, dV - \int_{\partial\Omega_t} \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \hat{\underline{U}} \, dS - \int_{\Sigma_t} \llbracket \underline{\underline{\sigma}} \rrbracket \cdot \underline{n} \cdot \hat{\underline{U}} \, dS \end{aligned}$$

En l'absence d'efforts extérieurs sur Σ_t , la puissance virtuelle des efforts intérieurs devient :

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega_t} (\underline{\text{div}}(\underline{\underline{\sigma}}) + \rho(\underline{f}^e - \frac{d\underline{U}}{dt})) \cdot \hat{\underline{U}} \, dV + \\ &\int_{\partial\Omega_t} (\underline{T}_\Omega - \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}}) \cdot \hat{\underline{U}} \, d\partial\Omega + \int_{\Sigma_t} ((\llbracket \underline{\underline{\sigma}} \rrbracket - \rho \llbracket \underline{U} \rrbracket \otimes \underline{V}) \cdot \underline{n} \cdot \hat{\underline{U}}) \, dS = 0 \end{aligned} \quad (1.23)$$

où \underline{f}^e est la densité d'efforts extérieur volumique, et \underline{T}_{Ω} les efforts surfaciques sur $\partial\Omega_t$.

Localement, cette relation est traduite par les équations :

$$\operatorname{div}(\underline{\sigma}) + \rho(\underline{f}^e - \frac{d\underline{U}}{dt}) = 0 \text{ sur } \Omega_t \quad (1.24)$$

$$\underline{\sigma} \cdot \underline{n} = \underline{T}_{\Omega_t} \text{ sur } \partial\Omega_t \quad (1.25)$$

$$\llbracket \underline{\sigma} \rrbracket \cdot \underline{n} = \rho \llbracket \underline{U} \rrbracket \otimes \underline{V} \cdot \underline{n} \text{ sur } \Sigma_t \quad (1.26)$$

La projection de l'équation d'équilibre sur le front montre que le tenseur des contraintes, dans le cas d'une discontinuité faible du champ de déplacement, subit un saut à l'interface de changement de phase.

Premier principe

En l'absence de source de chaleur externe, le premier principe de la thermodynamique s'écrit, en tenant compte de la discontinuité de $\underline{\sigma}$ et \underline{U} :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho \left(e + \frac{U^2}{2} \right) dV &= \int_{\Omega_t} \underline{f}^e \cdot \underline{U} + \sigma^e dV + \int_{\partial\Omega_t} \underline{\sigma} \cdot \underline{n} \cdot \underline{U} - \underline{q} \cdot \underline{n} dS \iff \\ &\int_{\Omega_t} \rho \left(\frac{de}{dt} + \frac{1}{2} \frac{dU^2}{dt} \right) - \underline{f}^e \cdot \underline{U} - \nabla \cdot (\underline{\sigma} \cdot \underline{U}) + \nabla \cdot \underline{q} dV = \\ &- \int_{\Sigma_t} \rho \left[e + \frac{U^2}{2} \right] \underline{V} \cdot \underline{n} - \llbracket \underline{\sigma} \cdot \underline{U} \rrbracket \cdot \underline{n} + \llbracket \underline{q} \rrbracket \cdot \underline{n} dS \end{aligned} \quad (1.27)$$

où e représente la densité d'énergie interne, \underline{q} le courant de chaleur sortant.

Les équations locales associées sont alors :

$$\rho \frac{d}{dt} \left(e + \frac{U^2}{2} \right) - \underline{f}^e \cdot \underline{U} - \nabla \cdot (\underline{\sigma} \cdot \underline{U}) + \nabla \cdot \underline{q} = 0 \text{ sur } \Omega_t \quad (1.28)$$

$$\rho \left[e + \frac{U^2}{2} \right] \underline{V} \cdot \underline{n} - \llbracket \underline{\sigma} \cdot \underline{U} \rrbracket \cdot \underline{n} + \llbracket \underline{q} \rrbracket \cdot \underline{n} = 0 \text{ sur } \Sigma_t \quad (1.29)$$

1.3.3 Equilibre matériel et forces motrices

Le cadre présenté ci-avant permet d'obtenir un modèle mécanique pour le changement de phase allotropique. Cependant, nous avons présupposé que la vitesse du front était connue, ce qui n'est généralement pas le cas. Pour obtenir une information sur la vitesse du front, nous utilisons le formalisme de la mécanique Eshelbienne [ESH 57, ESH 51].

L'intérêt de la mécanique Eshelbienne est d'introduire la notion de force matérielle. Cette force matérielle relie la variation de la géométrie du média à son énergie potentielle. Ainsi, il est possible de déterminer quelle disposition géométrique du matériau permet de minimiser l'énergie potentielle.

Equilibre matériel pour un milieu continuellement hétérogène

Le théorème de Noether permet de déterminer les lois de conservation associées à un système dont le Lagrangien est connu. Il s'exprime par :

A toute transformation infinitésimale qui laisse invariante l'intégrale d'interaction correspond une grandeur qui se conserve.

1. Description mécanique d'un changement de phase allotropique

L'intérêt de ce théorème est d'introduire simplement les notions de la mécanique Eshelbienne. Nous admettons ici que l'intégrale d'interaction se conserve pour une transformation infinitésimale des coordonnées matérielles en translation. Cette transformation infinitésimale s'écrit :

$$\underline{x}^* = \underline{x} + \varepsilon \underline{\xi}(x, \underline{u}) \quad (1.30)$$

Dans un premier temps, nous supposons que le milieu est continuellement hétérogène -pas de saut des propriétés matérielles- et non dissipatif. De plus, les développements sont effectués dans un cadre quasi-statique, c'est à dire que la densité d'énergie cinétique est considérée négligeable. Le lagrangien du problème mécanique s'écrit, avec \mathcal{W} la densité d'énergie interne du système :

$$L = -\mathcal{W}(x, \underline{u}, \underline{\nabla}u) \quad (1.31)$$

où \underline{u} désigne le champ de déplacement.

Le lagrangien exhibé ici présente la particularité de dépendre explicitement des coordonnées. Cette dépendance traduit l'hétérogénéité du matériau.

Associée à ce Lagrangien, l'intégrale d'interaction est définie par :

$$A = \int_{\Omega} L(x, \underline{u}, \underline{\nabla}u) \, dV \quad (1.32)$$

La modification de l'intégrale d'interaction A par la transformation 1.30, A^* , s'écrit, après simplification :

$$A^* = A + \varepsilon \int_{\Omega} \text{div}P + \underline{Q} \cdot \underline{E}(L) \, dV \quad (1.33)$$

où, sous l'hypothèse d'invariance de A^* , sont définies les quantités :

– équations d'Euler-Lagrange :

$$\underline{E}(L) = \frac{\partial L}{\partial \underline{u}} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial L}{\partial \underline{\nabla}u} \right) \quad (1.34)$$

– caractéristique \underline{Q} :

$$\underline{Q} = -\underline{\xi} \cdot \underline{\nabla}u \quad (1.35)$$

– courant ou flux \underline{P} :

$$\underline{P} = \underline{\xi}L + \underline{Q} \cdot \frac{\partial L}{\partial \underline{\nabla}u} \quad (1.36)$$

Lorsque \underline{u} est solution du problème d'équilibre, les équations d'Euler-Lagrange sont identiquement nulles. D'autre part, pour des transformations infinitésimales bien choisies, c'est à dire telles que $A^* = A$, les équations de conservation s'écrivent :

$$\text{div}\underline{P} = 0 \quad (1.37)$$

Avec l'invariance de l'intégrale d'interaction par translation sur l'espace matériel, admis précédemment, l'équation d'équilibre matériel devient :

$$\text{div}(\underline{b}) = -\underline{f}^{inh} \quad (1.38)$$

avec :

$$\underline{b} = -\underline{\nabla}u \cdot \underline{\sigma} - L\underline{Id} \text{ et } \underline{f}^{inh} = \frac{\partial L}{\partial x} \quad (1.39)$$

où \underline{b} est le tenseur d'Eshelby, et \underline{f}^{inh} désigne le champ de force matérielle.

Ainsi, *via* le théorème de Noether, nous obtenons une équation d'équilibre sur le tenseur d'Eshelby. L'équation d'équilibre 1.38 traduit l'application d'une transformation infinitésimale sur les coordonnées spatiales. Dans un cadre général, elle est définie sur la configuration de référence et traduit la dépendance du lagrangien au matériau. Cette force est donc représentative de l'hétérogénéité du matériau. La relation d'équilibre incluant le tenseur traduit la possibilité d'estimation de l'hétérogénéité du matériau à partir du tenseur d'Eshelby.

Enfin, le champ de force matériel \underline{f}^{inh} est identiquement nul pour un matériau homogène. Cette propriété a été utilisée pour améliorer la qualité de solutions éléments finis de problèmes mécaniques par la production de maillages permettant de vérifier cette condition [MUE 02].

Equilibre matériel pour un milieu homogène par morceaux

Dans le cas d'un milieu subissant une discontinuité de ses propriétés matérielles, le travail précédent est invalidé.

Le front de changement de phase peut-être considéré comme induisant un réarrangement local du matériau. Il semble alors évident d'étudier la propagation de l'interface dans l'optique de la mécanique Eshelbienne.

Par rapport aux équations d'équilibre présentées précédemment, la présence d'une surface de discontinuité Σ entraîne une brisure de la symétrie spatiale. La transformation infinitésimale 1.30 utilisée auparavant n'est donc plus valide que par morceaux sur les domaines Ω^α et Ω^γ (*cf.* fig. 1.8). Cela entraîne l'apparition de termes d'équilibre sur le front associés au problème d'équilibre matériel.

En tenant compte de cette brisure de symétrie, la projection sur le front Σ de l'équation d'équilibre 1.38 s'écrit :

$$[[\underline{b}]] \cdot \underline{n} = -\underline{f}^\Sigma \quad (1.40)$$

\underline{f}^Σ caractérise l'hétérogénéité matérielle induite par la présence du front Σ .

Le travail précédent montre l'existence d'une force matérielle définie uniquement sur le front Σ . Par contre, rien ne nous permet pour l'instant d'affirmer que cette force est duale de la vitesse du front.

Second principe pour un milieu homogène par morceaux

La démonstration de la relation entre la force matérielle \underline{f}^Σ et la vitesse du front [TRU 87, MAU 95b, MAU 95a] passe par l'utilisation de la projection du second principe sur le front. Dans cette optique, il convient de considérer deux hypothèses physiques.

Premièrement, l'avancée du front induit la dissipation d'énergie de par l'action de mécanismes de réarrangement à l'oeuvre dans l'épaisseur du front et non modélisés dans nos hypothèses. Cet aspect dissipatif est justifié à une échelle macroscopique par l'irréversibilité constatée d'un changement de phase, et la caractérisation exothermique réalisée par des mesures de température locale.

Deuxièmement, nous considérerons que le champ de température absolue θ ne subit pas de discontinuité à l'interface de changement de phase. La continuité d'ordre au moins C^0 du champ de température est assurée par l'intermédiaire de l'équation de conductivité classique à l'échelle des milieux continus, elle est donc valable à notre échelle de modélisation.

La projection du second principe sur le front Σ exprimée *via* l'entropie s est donnée par :

$$V[[s]] - \underline{n} \cdot \frac{[[q]]}{\theta^\Sigma} = \sigma^\Sigma \quad (1.41)$$

où σ^Σ est l'entropie produite sur le front, le second principe s'exprimant par :

$$\sigma^\Sigma \geq 0 \quad (1.42)$$

D'autre part, la force matérielle \underline{f}^Σ peut-être associée a une puissance "matérielle" dissipée p^Σ *via* l'avancée du front et définie par :

$$p^\Sigma = \underline{f}^\Sigma \cdot \underline{V} \quad (1.43)$$

L'utilisation de la projection des équations d'équilibre sur le front, 1.18, 1.26, 1.29 et 1.41, permet alors d'écrire la correspondance entre puissance dissipée et entropie produite par :

$$p^\Sigma = \underline{f}^\Sigma \cdot \underline{V} = \theta^\Sigma \sigma^\Sigma \quad (1.44)$$

La dernière expression montre que la puissance dissipée par la force matérielle \underline{f}^Σ est directement responsable de l'entropie produite sur le front. En outre, cette relation permet d'affirmer la dualité entre force matérielle \underline{f}^Σ et vitesse du front. Ainsi, par la suite, l'appellation force motrice désignera \underline{f}^Σ qui caractérise la propagation du front. Le travail accompli dans le cadre de la mécanique Eshelbienne permet ainsi de déterminer une relation entre l'état mécanique du milieu et la vitesse du front *via* la force motrice.

En outre, l'existence d'une relation de dualité entre force motrice et vitesse du front nous permet d'affirmer l'existence d'une relation de comportement entre force motrice et vitesse du front.

Enfin, dans des développements qui ne seront pas effectués ici, il est possible de montrer [FOM 96, MAU 98] que ces résultats restent valides pour un matériau anélastique décrit par des variables internes. De plus, il a été montré que le cadre quasi-statique n'est pas réducteur pour l'obtention de cette expression, c'est à dire que les effets dynamiques n'entrent pas directement en jeu pour la détermination de l'avancée du front [KIE 00].

1.4 Simulation mécanique d'un acier subissant un changement de phase

1.4.1 Modèles existants

Modèles structuraux

Une première famille de modèles s'intéresse à décrire le changement de phase et ses conséquences mécaniques à l'échelle d'une déformation macroscopique homogénéisée. Ce type de modèle s'appuie généralement sur la possibilité de partition du taux de déformation macroscopique plastique :

$$\dot{E} = \dot{E}_S^{cp} + \dot{E}_T^{cp} + \dot{E}_z^{tp} \quad (1.45)$$

où les exposants cp et tp désignent la plasticité classique et la plasticité induite par la transformation, et les indices S , T , z indiquent la dépendance des termes macroscopiques à, respectivement, la contrainte macroscopique, la température et la proportion de phase.

Dans ce contexte, le terme intérêt est celui relié à la plasticité de transformation, \dot{E}_z^{tp} . Son estimation réside généralement sur une homogénéisation du milieu pendant le changement de phase.

Une approche typique est celle de Leblond [LEB 86a, LEB 86b, LEB 89a, LEB 89b] complété par Taleb [TAL ed] ainsi que Valance [VAL 07] qui consiste à considérer que le milieu peut-être réduit durant le changement de phase à la croissance d'une phase fille géométriquement sphérique dans une phase mère elle aussi sphérique. Cette approche permet uniquement de représenter le mécanisme de Greenwood dans la mesure où l'orientation des variantes n'est pas prise en compte.

D'autres modèles géométriques locaux ont été mis au point pour tenir compte du mécanisme de Magee. C'est par exemple le cas du modèle proposé par Fischer [FIS 90] qui tient compte d'un cisaillement possible à l'interface dû à l'apparition de variantes martensitiques. Ensuite, un traitement statistique sur le nombre de variantes possibles et leur possibilité d'occurrence, lui permet d'homogénéiser ce terme de cisaillement et d'obtenir une loi générale.

Ces modèles permettent d'obtenir une équation sur le taux de déformation plastique de transformation sous la forme :

$$\dot{E}^{tp} = f(z, \dot{z}, \sigma_y, \Delta \epsilon_{\gamma, \alpha}, \dots) S \quad (1.46)$$

où S est le déviateur des contraintes macroscopique.

La caractéristique principale de cette famille est la colinéarité entre le déviateur des contraintes et le taux de déformation plastique de transformation. Cette colinéarité est généralement mise en échec pour des chargements non proportionnels [COR 02].

Enfin, une autre approche homogénéisée intéressante est proposée par [IWA 04]. Dans ce modèle, chaque élément fini composant la structure contient une latte de martensite de forme ellipsoïdale grandissant au fur et à mesure de la transformation et permettant d'approcher l'interaction due à la croissance de martensite dans une matrice austénitique.

Modèles cristallographiques

A l'opposé des modèles présentés précédemment, se situent les modèles travaillant à l'échelle du grain. Dans ces modèles, la microstructure est exactement modélisée, tenant compte des orientations et plan cristallographiques. Cette famille autorise la représentation du mécanisme de Magee.

Les premières simulations réalisées sont issues du travail de Ganghoffer [GAN 93] pour un monograin dans le cas d'apparition de lattes martensitiques. L'apparition des lattes martensitiques est pilotée par un critère de maximum de force motrice. Malheureusement, le comportement plastique mono-cristallin reste difficile à estimer correctement.

Pour les simulations de type diffusives, les travaux de Serre sur la modélisation géométrique de la croissance des grains devraient permettre, à terme, la modélisation mécanique de problèmes de changement de phase.

Méthodes intermédiaires

Entre les deux représentations sus-citées prennent place des modèles tenant compte localement du type de phase. L'interface est alors modélisée soit implicitement, soit explicitement.

La méthode des champs de phase offre une représentation implicite de l'interface [FAB 97]. Ainsi, soit une fonction thermodynamique $\phi(\underline{x}, t)$ représentant la phase au point \underline{x} . L'évolution de cette fonction est alors pilotée par des considérations d'ordre thermodynamique. Il n'y a pas de modélisation explicite du front.

Pour ce type de modèle, il faut construire des densités d'énergie libre représentatives de l'évolution des phases en fonction des variables de modélisation. Généralement ces densités sont construites à partir de situations limites caractérisées par d'autres méthodes de modélisation.

L'application principale actuelle de cette famille de méthodes est la modélisation de solidification d'alliages binaires ou ternaires.

Enfin, avec l'apparition de la méthode des éléments finis étendus permettant la modélisation élément fini de déplacement discontinus sans remaillages, permet la discrétisation de problèmes de changement de phase où l'interface est représentée explicitement. A notre connaissance, cette méthode n'a été appliquée qu'à des problèmes de solidification où le mouvement de l'interface est piloté par une loi diffusive de type Stefan [MER 02], ou encore à des problèmes de changement de phase martensitique mais sans tenir compte de l'état mécanique [HOU 99].

1.4.2 Travail envisagé

La première partie de ce chapitre montre l'aspect cristallin du changement de phase. Ce changement de phase peut aussi être considéré à une échelle supérieure et d'un point de vue purement heuristique ainsi que l'envisage le point de vue métallurgique. Enfin, dans ce que nous définissons comme l'échelle mésoscopique, le milieu est considéré comme hétérogène par morceaux, c'est à dire représente explicitement le front tout en conservant une description homogénéisée du matériau.

La vision mécanicienne mésoscopique, même si elle ne présente pas d'aspect explicatif du changement de phase aussi bien que du phénomène de plasticité de transformation permet, par contre, à partir des remarques qualitatives heuristiques, de produire une vision quantitative du phénomène de changement de phase au sens où elle permet de connaître l'état mécanique local à tout instant.

La section 1.3.3 a permis de souligner la liaison intime entre la propagation du front de changement de phase et l'état mécanique en amont et en aval du front. Pour accéder à une modélisation correcte de cette propagation, il faut donc tenir compte de cet état explicitement. Pour cette raison, les simulations que nous développerons tiendront compte explicitement du front de changement de phase.

Malgré tout, il est très coûteux en terme de degrés de liberté de vouloir modéliser le matériau à l'échelle cristallographique. Puisque il est souhaité d'arriver à une modélisation représentative de l'état de la structure, nous utiliserons un modèle de comportement homogénéisé du matériau.

Le mécanisme de changement de phase allotropique dans les aciers doit être envisagé pour des transformations diffusives ou displacives. Pour une transformation diffusive, le comportement du front sera piloté par une force motrice évaluée à partir d'un calcul mécanique. Pour une transformation displacive, l'apparition brutale des phases martensitiques amènent à modéliser une apparition brutale des phases, indépendamment de la force motrice.

Enfin, la description envisagée doit s'appuyer au maximum sur l'obtention de données expérimentales absentes pour le moment. Les moyens d'investigation classiques permettent soit d'obtenir une information locale avant ou après transformation, soit une information homogénéisée pendant la transformation. Le second objectif poursuivi dans ce travail est la mise en place de moyens expérimentaux permettant de déterminer l'évolution topologique des phases pendant la transformation.

Chapitre 2

Caractérisation expérimentale de changement de phase

Les moyens expérimentaux d'investigation du phénomène de changement de phase présentés dans le chapitre 1 permettent soit une observation à l'échelle du grain, mais pré- ou post-mortem, soit une observation dynamique mais macroscopique. Pour avoir une référence critique de l'état mécanique local, nous avons cherché à mettre au point un moyen d'observation dynamique local de l'évolution des phases.

Sommaire

2.1	Objectif, matériau, microstructure	20
2.1.1	Observations envisagées	20
2.1.2	Matériau testé	20
2.2	Dispositif expérimental	21
2.2.1	Analyse fonctionnelle des besoins	21
2.2.2	Description fonctionnelle	22
2.3	Observations	27
2.3.1	Analyse macroscopique d'un essai	28
2.3.2	Analyse mésoscopique d'un essai	30
2.4	Conclusions - perspectives	37

2.1 Objectif, matériau, microstructure

2.1.1 Observations envisagées

Lors du premier chapitre, nous avons souligné l'importance d'obtenir de l'information sur l'évolution du front pendant une transformation. D'autre part, nous avons vu que le concept de force motrice permettait de relier l'état mécanique à la vitesse du front. Cependant, dans la mesure où aucune confirmation expérimentale n'est apportée, nous avons fait le choix de déterminer une expérience permettant *a minima* d'observer les conséquences locales d'un changement de phase sur le champ de déplacement. D'autre part, si le raisonnement précédent est bien adapté pour un changement de phase diffusif, les conditions lors d'un changement de phase martensitique sont drastiquement différentes. L'observation de ce type de changement de phase pourrait donc permettre d'alimenter une simulation numérique du problème.

La conséquence mécanique la plus visible d'un changement de phase allotropique sur le champ de déplacement est l'apparition d'une discontinuité faible de ce champ à l'interface. Par conséquent, la détermination de l'interface de changement de phase est envisageable à l'aide du champ de déplacement local à la surface de l'échantillon. Les performances, en termes de résolution spatiale et temporelles, des techniques de corrélation d'images numériques, semblent offrir un moyen adapté pour l'obtention de ce champ de déplacement.

L'utilisation de cette méthode sur une éprouvette soumise à un chargement thermo-mécanique devrait permettre de retrouver le front de changement de phase ou tout au moins sa conséquence sur le champ de déplacement.

2.1.2 Matériau testé

Le matériau testé est un acier de type maraging steel. La nuance utilisée a pour nom commercial marval X12 (Aubert & Duval), sa composition est donnée dans le tableau 2.1.

C	Si	Mn	S	P	Ni	Cr	Mo	Al	Ti	Fe
<.01	.06	.04	<.002	.005	9.01	12.20	2.	.71	.33	bal.

TAB. 2.1 – Composition massique du marval X12 en %.

Cet acier fortement allié se caractérise essentiellement par la quasi-absence de carbone. Dans l'état de livraison, il est sous forme martensitique. La dureté du réseau martensitique n'est pas obtenue par la présence de carbone, mais par la formation de précipités de molybdène et d'aluminium. Une macrographie du marval X12 dans l'état de livraison est présentée sur la figure 2.1(a).

La composition chimique de cet acier présente plusieurs avantages. Le premier, lié à la quasi absence de carbone, est de supprimer les problèmes de décarburation à haute température. Le second est qu'il s'agit d'un acier dit auto-trempable : il forme toujours une phase martensitique quelque soit la vitesse de refroidissement. Cela va permettre, *a priori*, d'étudier aussi bien une transformation de type diffusive -au chauffage- qu'une transformation displacive -au refroidissement.

Dans son état de livraison (figure 2.1(a)), le marval X12 subit un traitement de trempé puis de durcissement structural, entraînant la croissance des précipités de molybdène et d'aluminium, après le procédé de mise en forme (*cf.* fig. 2.2). Pour faciliter les manipulations expérimentales, nous avons fait subir au marval X12 un traitement thermique visant, d'une part à supprimer l'écrouissage

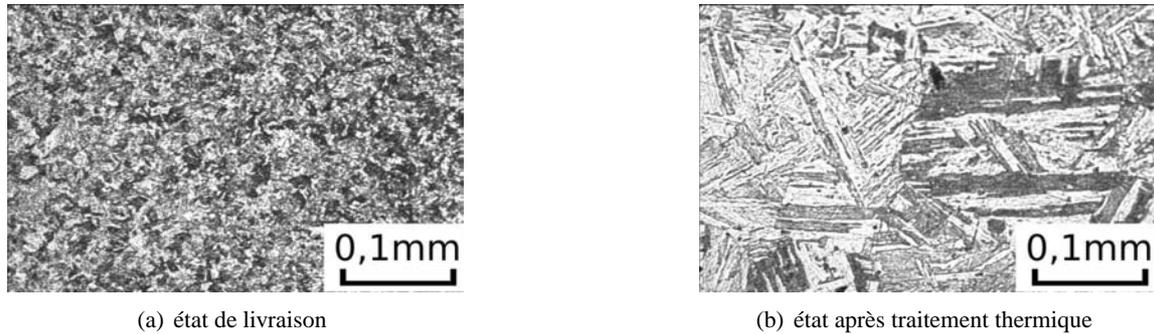


FIG. 2.1 – Macrographies de la surface attaquée de marval X12.

[TAN 03] issu du procédé de fabrication puis un traitement, présenté figure 2.2, visant à augmenter la taille de grain. Une macrographie de l'acier après traitement thermique est présentée figure 2.1(b). Par rapport à l'état de livraison les lattes de martensites incluses dans les anciens grains austénitiques sont distinguables.

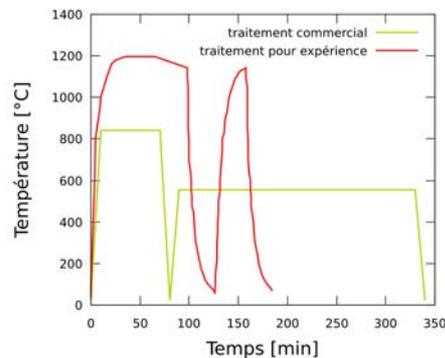


FIG. 2.2 – Traitements thermiques réalisés par le fabricant, et pour les besoins expérimentaux.

2.2 Dispositif expérimental

2.2.1 Analyse fonctionnelle des besoins

L'analyse fonctionnelle est représentée sur la figure 2.3 par l'intermédiaire d'un diagramme pieuvre. Il permet ici de présenter facilement les objectifs que doit remplir le moyen expérimental d'observation de phase, appelé TRIPbox. Les fonctions technologiques associées à ce diagramme sont présentées ci-après.

- **Fonction Principale** : permettre l'observation de fronts de changement de phase au sein d'un matériau métallique
- **Fonction Complémentaire 1** : maintenir une éprouvette du matériau souhaité
- **Fonction Complémentaire 2** : acquérir des images de la surface de l'éprouvette
- **Fonction Complémentaire 3** : protéger l'éprouvette de l'atmosphère
- **Fonction Complémentaire 4** : appliquer un chargement mécanique à l'éprouvette

- **Fonction Complémentaire 5** : appliquer un chargement thermique à l'éprouvette
- **Fonction Complémentaire 6** : mesurer le chargement appliqué

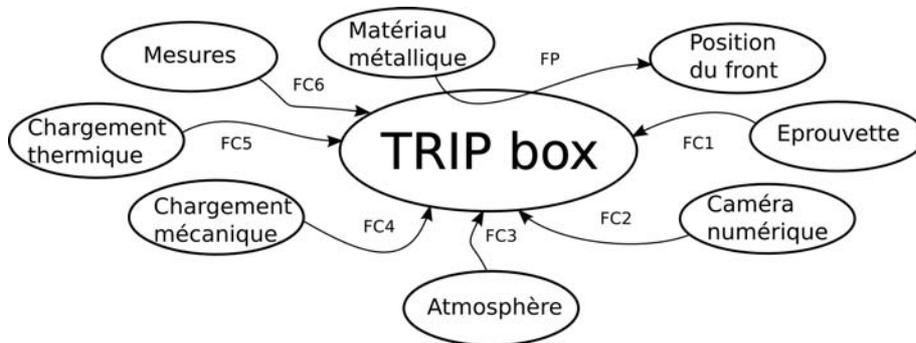


FIG. 2.3 – Diagramme pieuvre pour l'analyse fonctionnelle du dispositif expérimental TRIPbox.

Le définition des fonctions principale et complémentaires permet alors leur traduction en solution technologiques.

2.2.2 Description fonctionnelle

Maintenir une éprouvette du matériau souhaité

Pratiquement, l'éprouvette est maintenue par adhérence sur un mors fixe et un mors mobile par l'intermédiaire de brides. Entre ces deux zones de préhension, la zone utile de l'éprouvette est conçue pour contenir transversalement une moyenne d'une dizaine de grain.

L'importante différence de volume entre la zone utile et les zones de préhension permet de plus d'assurer une bonne évacuation de la chaleur et ainsi de contenir la zone affectée thermiquement. Cette géométrie minimise par ailleurs l'énergie nécessaire au chargement thermo-mécanique de l'éprouvette. Ces considérations ont permis de définir l'éprouvette présentée figure 2.4.

Protéger l'éprouvette de l'atmosphère

Lors du chauffage de l'acier, le potentiel d'oxydo-réduction du couple fer-oxygène augmente très rapidement. Cette augmentation du potentiel d'oxydo-réduction conduit à l'apparition, lors du chauffage en atmosphère non protégée, de corrosion à haute température. Il s'agit de la formation d'une couche d'oxyde en surface (fig. 2.5(a)), adhérente à haute température et se délitant lors du refroidissement (fig. 2.5(b)). Cette couche d'oxyde empêche l'observation de la surface, et rend impossible la corrélation des images acquises.

Pour supprimer cette corrosion, la solution globale consiste à placer la zone chauffée dans une atmosphère protectrice. L'atmosphère protectrice peut-être soit un gaz neutre, soit un vide partiel. Le chauffage de l'éprouvette est finalement réalisé sous vide partiel, permettant de réduire au maximum la concentration d'oxygène dans le boîtier.

Tous les éléments du dispositif expérimental intervenant mécaniquement sur l'éprouvette sont alors inclus dans un boîtier sous vide partiel. Une vue CAO de ce boîtier est présentée figure 2.6.

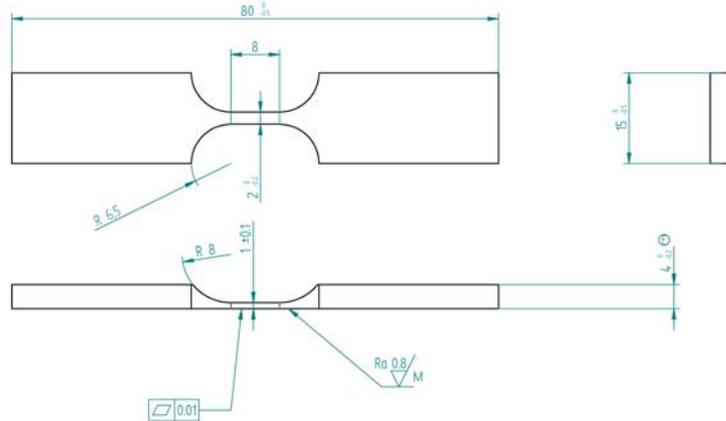
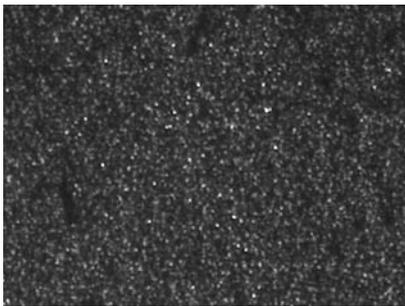
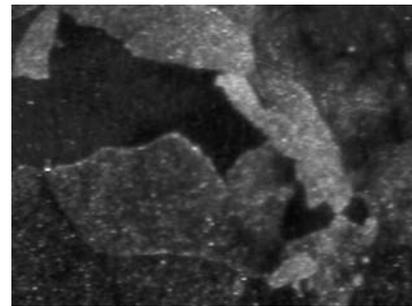


FIG. 2.4 – Dessin de définition de l'éprouvette.



(a) chauffage, 500°C



(b) refroidissement, 150°C

FIG. 2.5 – Formation et délitement du film de corrosion à haute température.

Dans le but de maîtriser le coût de la manipulation, la taille de la boîte est réduite au maximum par rapport à l'espace nécessaire pour loger tous les organes complémentaires. De plus le faible volume intérieur du boîtier permet une mise au vide rapide. Cette contrainte de compacité se retrouve par la suite à toutes les étapes de conception.

L'intérieur du boîtier est mis sous vide partiel pendant les manipulations. Le vide est obtenu par l'utilisation d'une pompe à palettes mono-étagée permettant d'atteindre en régime optimal un vide de 1Pa. Ce vide est suffisant pour minimiser le risque de corrosion à haute température.

Les signaux de contrôle et d'alimentation en énergie pénètrent le boîtier par des passages étanches.

Acquérir des images de la surface de l'éprouvette

Un hublot ménagé sur le couvercle du boîtier d'observation permet l'observation de la surface de l'éprouvette pendant son chargement. D'autre part, des LEDs de puissance sont utilisées pour l'éclairage de la face supérieure. Ces lampes sont disposées de façon à obtenir un éclairage rasant soulignant les irrégularités de la surface de l'éprouvette. Cette texture sera utilisée comme motif

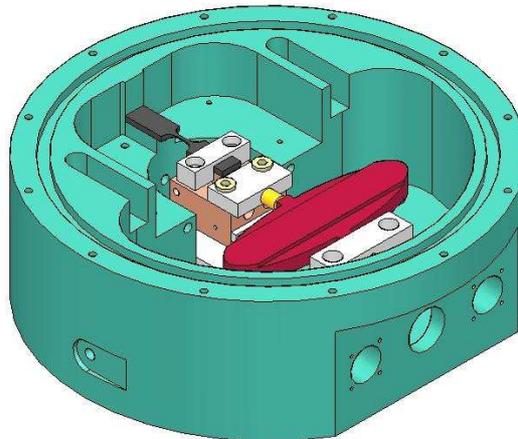


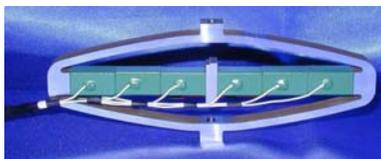
FIG. 2.6 – Vue CAO du boîtier, éprouvette et actionneur piézoélectrique.

pour la corrélation d'image afin d'obtenir le champ de déplacement en surface.

Les observations sont réalisées par le biais d'une caméra numérique 4.4Mpixels. La fréquence d'acquisition de la caméra utilisée, dans des conditions d'éclairages correctes est de 6Hz. La caméra est associée à un montage optique constitué d'une chambre noire et d'un objectif macroscopique. Ce montage optique permet d'atteindre un grossissement d'environ 4x. Pour optimiser ce grossissement, la conception du hublot est telle que la distance entre la face supérieure de l'éprouvette et l'objectif soit minimale.

A haute température -à partir de 400°C- une partie de l'énergie apportée pour le chauffage de l'éprouvette est dissipée en rayonnement. Ce rayonnement lumineux sature le capteur CCD de la caméra, même pour une ouverture maximale de l'objectif.

Appliquer un chargement mécanique à l'éprouvette



(a)

Caractéristiques actionneur piézo-électrique

déplacement	500 μ m
effort bloqué	570N
raideur	1,1.10 ⁶ N/m
résolution	2,4nm

(b)

FIG. 2.7 – Actionneur piézo-électrique.

La conception et l'intégration de l'actionneur mécanique dans le banc de test a été réalisée en collaboration avec W. Kurz, étudiant en master dans le cycle double diplôme Karlsruhe/INSA.

L'actionneur mécanique doit permettre l'application d'un chargement mécanique en effort, au minimum constant quelle que soit la dilatation de l'éprouvette. La géométrie de l'éprouvette, ainsi

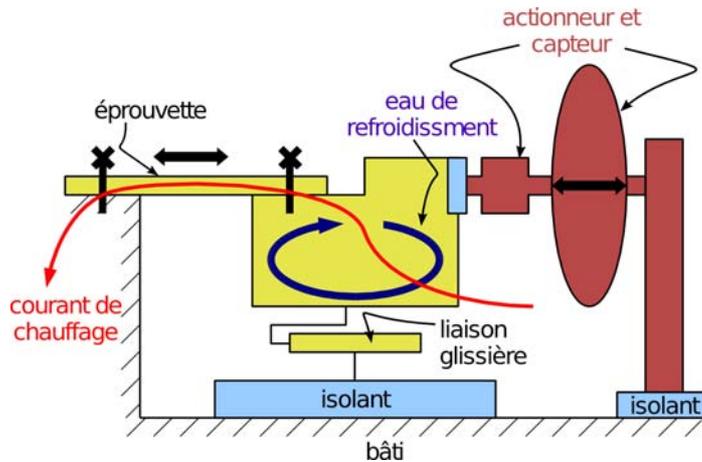


FIG. 2.8 – Schématisation de l'implantation des composants agissant physiquement dans le banc d'essai.

que les caractéristiques thermo-mécaniques du marval X12, ont permis de choisir l'actionneur présenté figure 2.7.

Compte tenu du faible espace disponible, l'actionneur choisi doit présenter un rapport volume puissance optimal. Il doit d'autre part être pilotable facilement en effort. La solution retenue est un actionneur piézo-électrique à amplification mécanique. Les avantages principaux sont la densité de puissance, ainsi que l'absence d'organes mobiles susceptibles d'interagir avec la contrainte de vide partiel.

En sus de l'actionneur, un capteur d'effort est placé en série avec le mors mobile. Le tout forme un système asservi à l'aide d'un régulateur doté d'un PID. Les paramètres du PID ont été optimisés pour le contrôle de la dilatométrie sous contrainte constante, c'est à dire la compensation d'une perturbation externe à consigne constante.

Les principes cinématique et statique du système de chargement mécanique sont schématisés figure 2.8. La liaison glissière entre le mors mobile et le bâti est réalisée par une glissière à bille permettant de reprendre les efforts transversaux, et de minimiser le frottement et les pertes dans cette liaison.

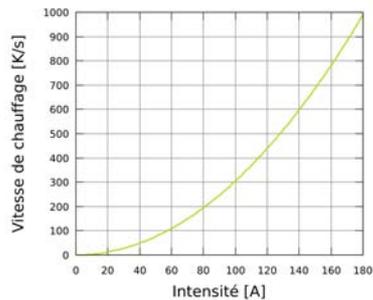
Appliquer un chargement thermique à l'éprouvette

Le chauffage d'une éprouvette en acier peut se faire soit par placement dans un four, soit par induction, soit par effet joule. La dernière solution a été retenue en raison de sa simplicité de mise en oeuvre au sein d'un environnement confiné.

La faible taille de la zone utile de l'éprouvette présente une résistance électrique élevée par rapport au bâti du banc d'essais. Cette résistivité élevée entraîne, lorsque l'éprouvette est parcourue par un courant électrique, la dissipation d'énergie électrique, et ainsi l'échauffement de la zone utile.

Les caractéristiques techniques de l'alimentation en courant sont présentées dans le tableau 2.9(b). Le contrôle est effectué sur l'intensité traversant le boîtier par l'intermédiaire d'un signal de commande en tension. La figure 2.9(a) présente une courbe de vitesse de chauffage de l'éprouvette,

2. Caractérisation expérimentale de changement de phase



(a) Vitesse de chauffage d'une éprouvette de section 2mm^2 .

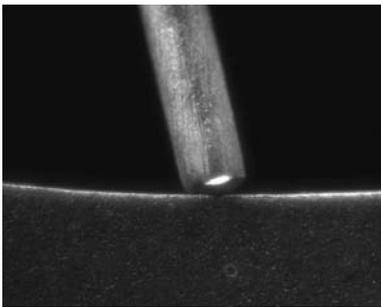
Caractéristiques alimentation régulée

plage de tension	0 ; 15V
plage de courant	0 ; 180A

(b)

FIG. 2.9 – Appliquer un chargement thermique.

en conditions adiabatiques, en fonction de l'intensité du courant la traversant.



(a) Extrémité du thermocouple en contact avec l'éprouvette.

Caractéristiques thermocouple gainé

plage de mesure	type K, -100°C ; 1300°C
temps de réponse	50ms
diamètre	0,5mm
métal de gaine	AISI 321

(b)

FIG. 2.10 – Thermocouple gainé pour la mesure de température.

Au sein du boîtier, trois ensembles sont isolés électriquement. Le premier est relié au mors fixe, et contient le bâti ainsi que les pièces non sensibles électriquement. Le second contient le mors mobile, et un connecteur étanche mécaniquement et électriquement. L'éprouvette réalise la jonction électrique entre les deux premiers ensembles. Enfin, un troisième ensemble n'est pas tout affecté par le courant de chauffage et contient l'actionneur piézoélectrique, le capteur d'effort, et le thermocouple de mesure de température.

Par ailleurs la température est régulée dans le reste du banc par refroidissement liquide. Un flux d'eau froide parcourt les zones servant à la préhension de l'éprouvette, limitant ainsi l'échauffement parasite du banc.

Mesures

Enfin le banc est complété par la mesure de la température, ainsi que de l'effort. La mesure de la température se fait *via* un thermocouple gainé présenté figure 2.10(a). La caractéristique de réponse de ce thermocouple est donnée figure 2.10(b). Le signal au bornes de la soudure froide est

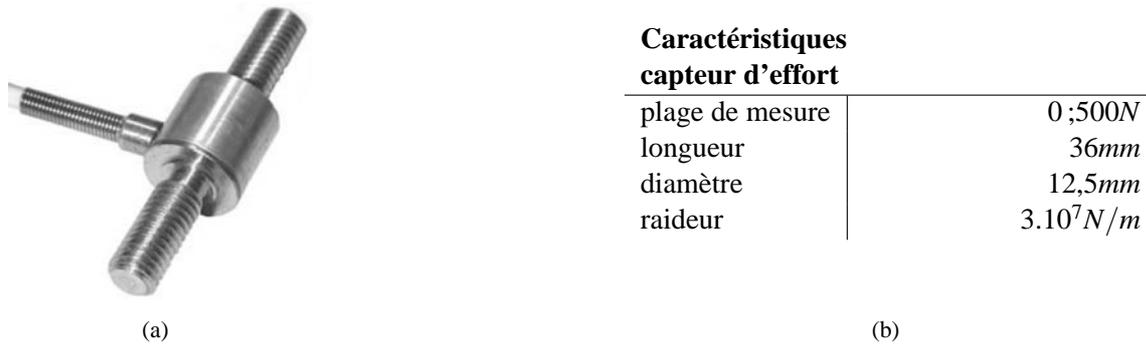


FIG. 2.11 – Capteur d'effort.

enregistré par un oscilloscope numérique. La température de référence de la soudure froide est fixée à $0^{\circ}C$ par l'utilisation d'un bain eau+glace.

Le capteur d'effort (fig. 2.11(a)) utilisé fonctionne par mesure de déformation de jauges collée sur un corps d'épreuve. Les caractéristiques du capteur sont résumées dans le tableau 2.11(b).

Boîtier réalisé

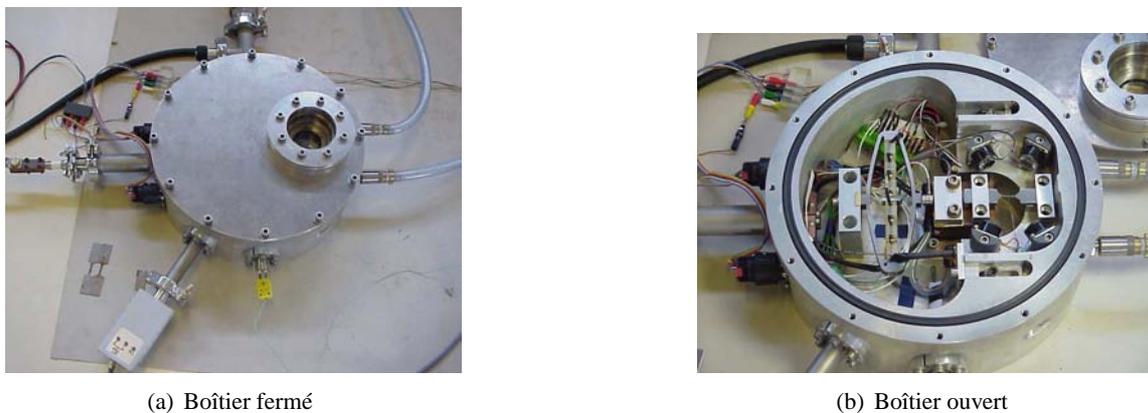


FIG. 2.12 – Boîtier d'observation.

Les figures 2.12 et 2.13 présentent le banc d'essai une fois réalisé.

2.3 Observations

La conception, la mise en place et l'utilisation du banc TRIPbox a permis de réaliser des observations satisfaisantes au refroidissement pendant le changement de phase martensitique. Nous avons sélectionné ici un essai sur lequel nous sommes appuyé pour interpréter localement les conséquences d'un changement de phase allotropique.



FIG. 2.13 – Vue panoramique du banc d'essais.

2.3.1 Analyse macroscopique d'un essai

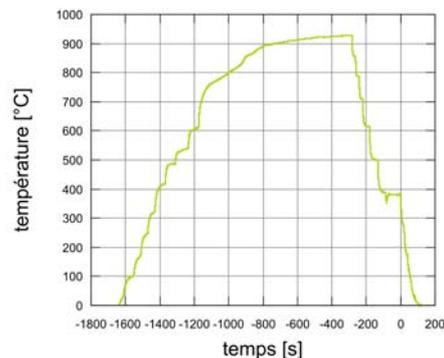


FIG. 2.14 – Evolution de la température au cours de l'essai.

La figure 2.14 montre l'évolution de la température au cours de l'essai. Dans un premier temps, l'éprouvette est chauffée jusqu'à 900°C , puis maintenue en température pendant 700s. L'éprouvette est alors refroidie en deux temps, une première phase jusqu'à 380°C . A cette température, le palier permet le réglage du système optique, tout en assurant que le changement de phase martensitique n'ai pas débuté. Enfin, l'éprouvette est refroidie jusqu'à la température ambiante. Pour éviter le flambage à haute température, l'éprouvette est légèrement chargée en traction tout au long de l'essai.

La surface de l'éprouvette est filmée à partir de 380°C . L'origine des temps prise au cours de cet essai correspond à la première acquisition de la surface de l'éprouvette. Comme le montre la figure 2.17, un dépôt se forme à la surface de l'éprouvette pendant l'essai, mais reste stable au refroidissement. Ce dépôt apporte la texture nécessaire à la corrélation d'image.

Pour l'analyse de l'essai, nous avons réalisé dans un premier temps une mesure de corrélation sur deux points. Cette mesure s'apparente à la mesure réalisable *via* un extensomètre. La figure 2.15(a) montre l'évolution de cette mesure de déformation et de la température. Il est aisé d'identifier le début de la transformation martensitique environ au temps 40s.

A partir de ce temps, la contraction due au refroidissement est mise en concurrence avec la

dilatation due au changement de phase. La température à laquelle se phénomène apparaît, 160°C , correspond à la valeur observée sur des essais macroscopiques[TAN 03, NAG 01].

Ce pré-traitement effectué, le champ de déplacement est corrélé sur le domaine Z présenté figure 2.17, uniquement sur les images acquises pendant le changement de phase. De ce champ de déplacement, il est possible de déterminer le champ de déformation. Les figures 2.15(b) et 2.15, présentent la moyenne de la déformation horizontale pendant le changement de phase.

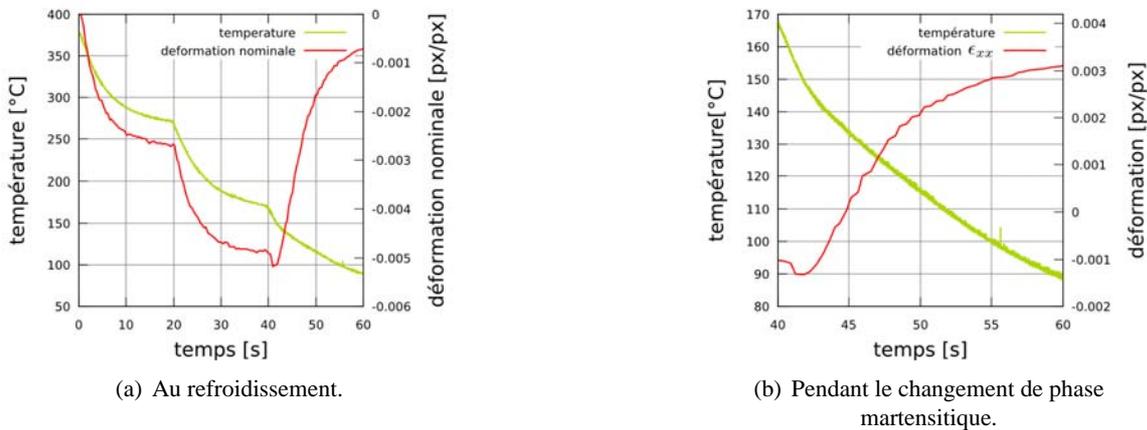


FIG. 2.15 – Déformation nominale.

En s'intéressant plus particulièrement la zone 40s – 60s pendant laquelle se produit le changement de phase, nous remarquons une inflexion de la température au temps 42s. Cette inflexion traduit le caractère exothermique de la transformation martensitique, et donc son début, au temps de réponse du thermocouple et de propagation de la chaleur près.

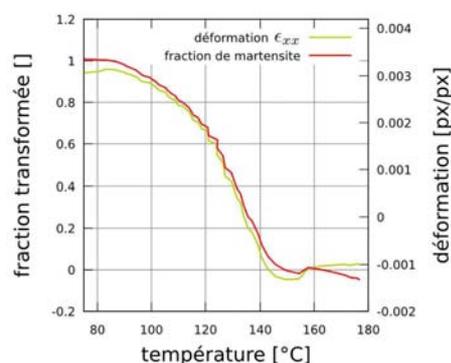


FIG. 2.16 – Fraction de phase transformée et déformation nominale en fonction de la température.

A partir de la mesure de déformation dans la direction horizontale, la courbe donnant la proportion de phase martensitique en fonction de la température est déterminée *via* la formule 1.3. Les

paramètres matériaux de dilatation pour les deux phases sont issus de [NAG 01, TAN 03] :

$$\begin{aligned} k_\alpha &= 20.10^{-6} \\ k_\gamma &= 12.10^{-6} \\ \Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{20^\circ C} &= -64.10^{-4} \end{aligned} \quad (2.1)$$

2.3.2 Analyse mésoscopique d'un essai

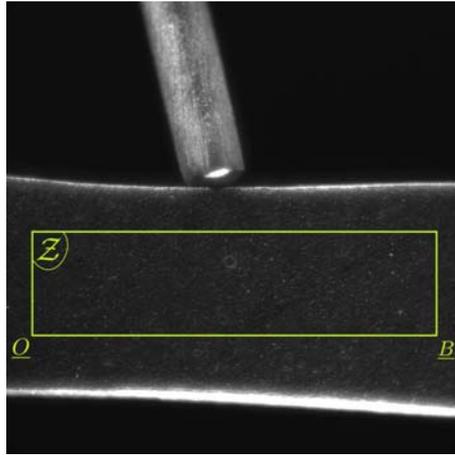


FIG. 2.17 – Zone d'intérêt pour la corrélation.

Technique de corrélation numérique d'image

A partir des images de la surface de l'éprouvette au refroidissement, pendant le changement de phase martensitique, l'utilisation de la technique de corrélation d'images permet de retrouver le champ de déplacement plan de cette surface. La technique de corrélation d'image consiste, à partir de deux images notées ici I et \hat{I} , à minimiser la fonction de corrélation C définie par :

$$\forall \underline{x} \in \mathcal{Z}, C(\underline{x}, \underline{u}^m) = \sum_{i \in \mathcal{P}} (I(\underline{x} + \underline{x}_i) - \hat{I}(\underline{x} + \underline{x}_i + \underline{u}^m))^2 \quad (2.2)$$

où \mathcal{P} est le sous ensemble de pixels sur lesquels la corrélation est effectuée, et \mathcal{Z} la zone corrélée, autrement appelée zone d'intérêt. La minimisation par rapport au champ mesuré \underline{u}^m peut être réalisée suivant divers schémas numériques. Dans la suite du chapitre, ce champ mesuré sera appelé \underline{u}^m .

Critère sur le champ de déplacement

Le champ de déplacement mesuré à partir de la corrélation, \underline{u}^m contient à la fois le champ de déformation issu de la corrélation entre les zone d'intérêt, et le champ de déplacement de solide rigide du au déplacement des zones adjacentes.

La définition d'un critère sur le champ de déplacement se devant d'être indépendant des événements extérieurs à la zone d'intérêt, il convient de supprimer le mouvement de solide rigide.

Considérant que tous les points du champ \underline{u}^m subissent le même déplacement, le champ mesuré est partitionnable suivant :

$$\forall \underline{M} \in \mathcal{Z}, \underline{u}^m = \underline{u}^u + \underline{u}^r \quad (2.3)$$

où \underline{u}^u est le champ de déplacement utile, alors que \underline{u}^r est le champ de déplacement de solide rigide.

Puisque $\mathcal{Z} \subset \mathbb{R}^2$, le mouvement de solide rigide comprend un mouvement de translation, \underline{u}^t , et un mouvement de rotation, ω . Le domaine de corrélation est considéré comme étant toujours rectangulaire, figure 2.17. Nous choisissons alors de fixer le point \underline{O} , et l'orientation de la droite (\underline{OB}) . le mouvement de solide rigide est alors pleinement déterminé et peut être retranché du champ de déplacement mesuré.

Pour des déformations thermiques dans un matériau de coefficient de dilatation homogène isotrope k_κ , la forme du champ de déplacement est facilement déterminable. En effet, dans le repère cylindrique $(\underline{O}, \underline{e}_r, \underline{e}_\theta)$, le champ de déplacement thermique s'écrit :

$$\underline{u} = k_\kappa r \underline{e}_r \quad (2.4)$$

Dans ce contexte, lors d'une dilatation libre, la norme du champ de déplacement observé présente des iso-valeurs circulaires. Le changement de phase peut alors être identifié dès lors que les iso-valeurs de la norme du champ de déplacement perdent leur concentricité.

Par ailleurs, ce critère est normalisé par son maximum sur la zone de corrélation pour une image donnée :

$$u_M = \frac{\|\underline{u}^u\|}{\max_{\underline{M} \in \mathcal{Z}} \|\underline{u}^u\|} \quad (2.5)$$

Le champ u_M est un champ stationnaire, caractérisé par des cercles concentriques, lorsque le chargement est thermique en dilatation pour un matériau homogène. Les figures 2.18 et 2.19 présentent l'évolution de ce critère sur les images observées entre les temps 40s et 60s.

La figure 2.18(a) montre effectivement un champ de déplacement dont les iso-contours sont des cercles concentriques centrés sur le point \underline{O} initialement. Ensuite, les iso-contours sont fortement perturbés. Il est difficile de préciser exactement les zones transformées à partir de cette représentation. A partir de l'image 2.18(r), correspondant à une température d'environ 120°C, le champ n'est quasiment plus modifié. Il est généralement admis, pour le phénomène de plasticité de transformation, que la majeure partie de la déformation plastique advient avant 50% de phase transformée. L'observation du champ de déplacement local tend à confirmer cette constatation en montrant qu'à partir de 45% de phase transformée, la variation locale du champ de déplacement s'affaiblit nettement.

Critère sur le champ de déformation

Le champ de déplacement ne permettant pas d'atteindre une reconnaissance de la topologie des phases, nous nous sommes ensuite appuyés sur un critère en déformation. Ce critère est à considérer avec précaution car le champ de déformation est issu d'un calcul *a posteriori* qui implique un lissage des résultats en déplacement de façon à minimiser le bruit dû à la dérivation numérique.

Pour représenter le champ de déformation, nous utilisons la norme :

$$\varepsilon_N = \sqrt{(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + 4\varepsilon_{xy}^2} \quad (2.6)$$

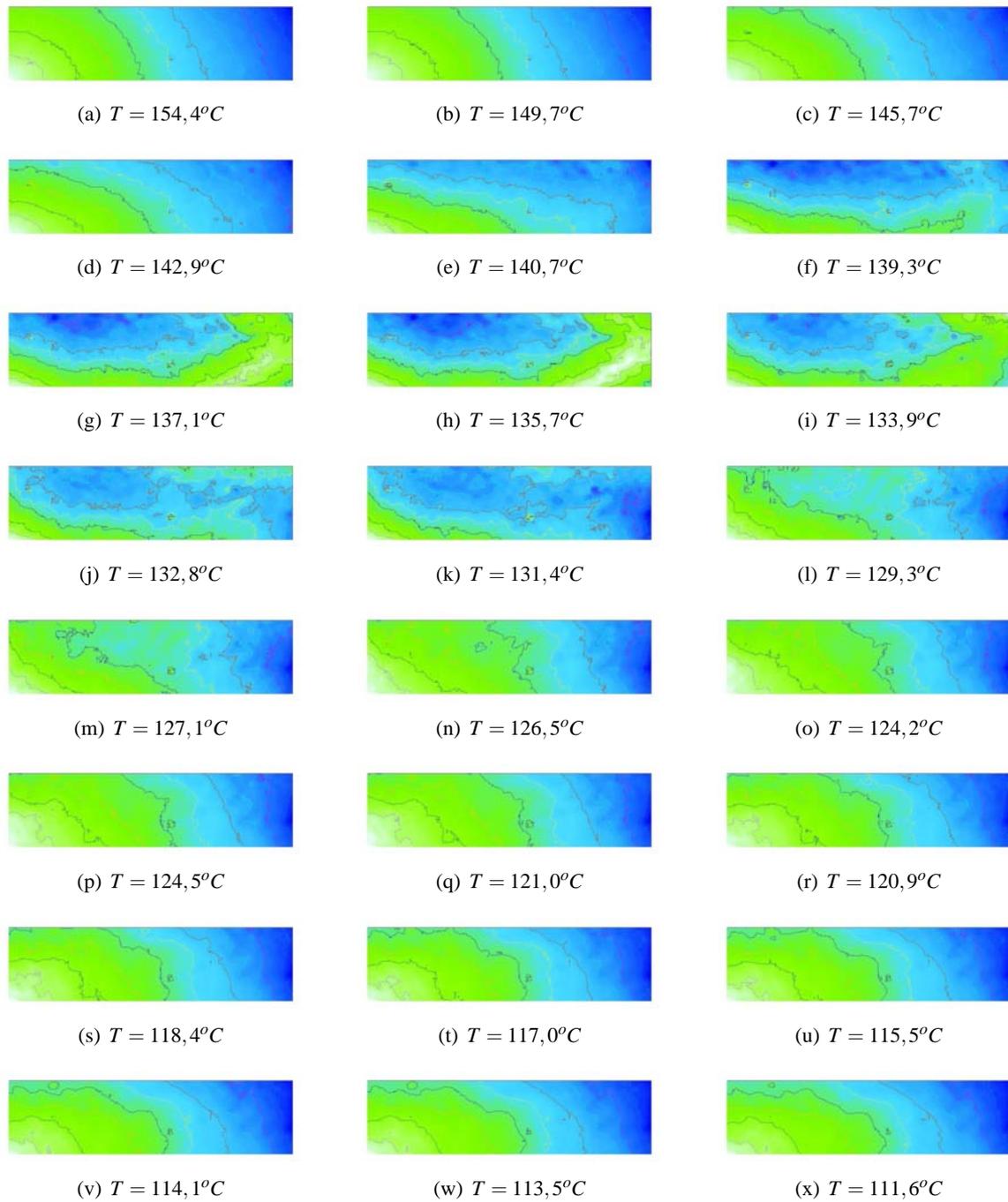


FIG. 2.18 – Champ de déplacement rationalisé pendant le changement de phase martensitique.

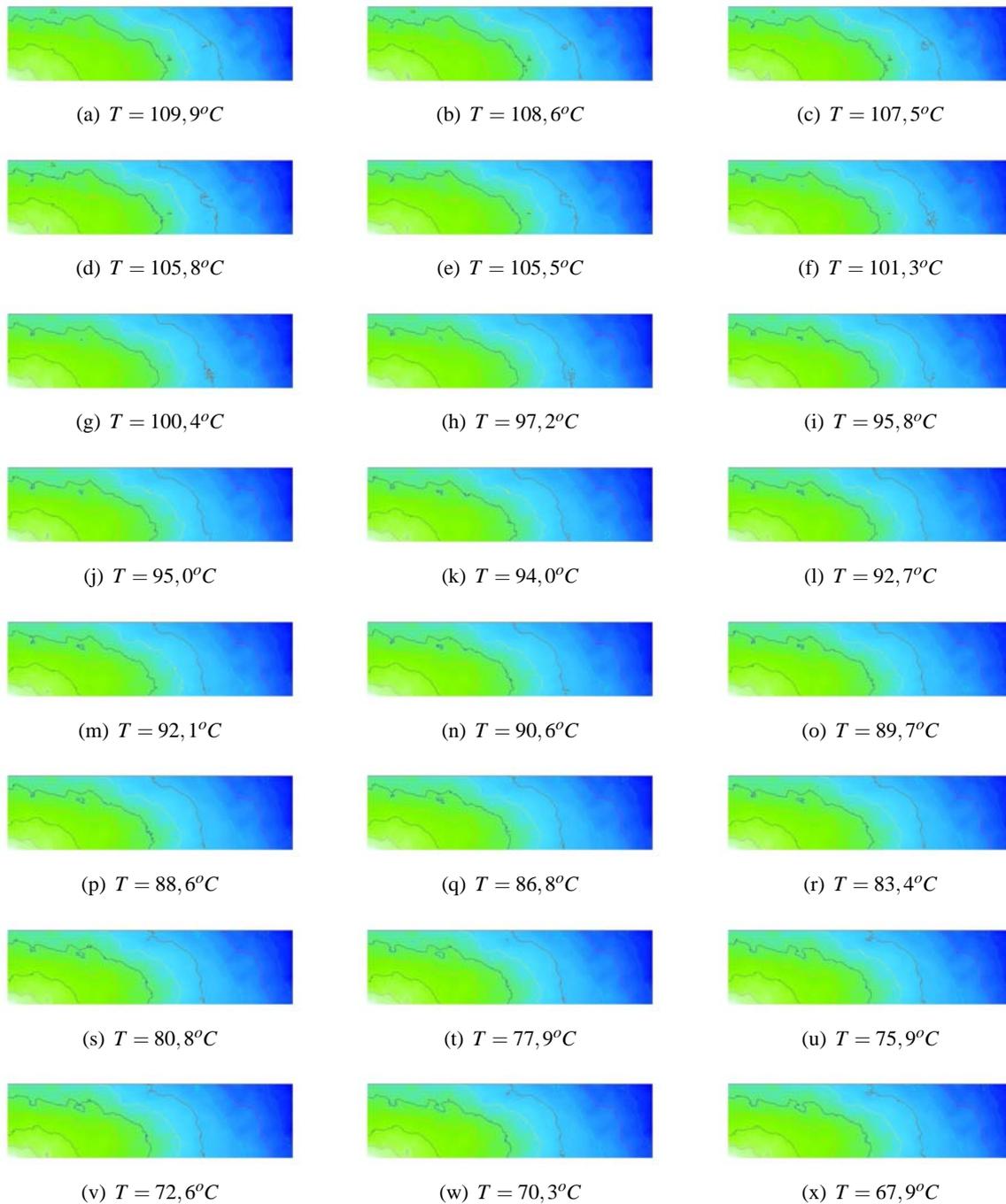


FIG. 2.19 – Champ de déplacement rationalisé pendant le changement de phase martensitique.

2. Caractérisation expérimentale de changement de phase

La norme ϵ_N permet de souligner le changement de phase. En effet, pour un champ de déplacement caractéristique d'une dilatation, le critère est constant. Cette norme permet en outre de souligner l'apparition de cisaillement *via* le terme ϵ_{xy}^2 .

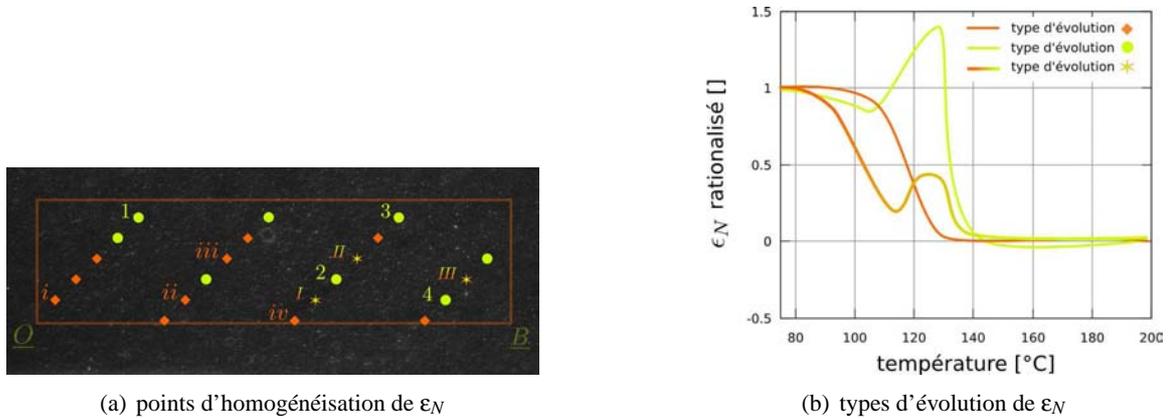


FIG. 2.20 – Typologie des évolutions de ϵ_N au cours du temps.

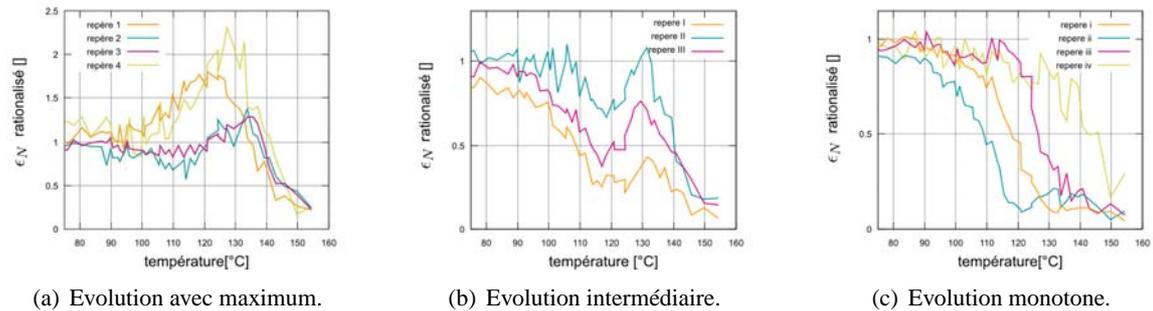


FIG. 2.21 – Typologie d'évolution : quelques exemples.

A partir de la norme ϵ_N , nous avons réalisé l'étude de l'évolution au cours de l'essai de la valeur homogénéisée aux points présentés figure 2.20(a). A partir de cette étude, nous avons pu construire une typologie de familles d'évolution de ce critère, présentée figure 2.20(b).

La typologie réalisée montre deux types d'évolution distincts. Le premier, figure 2.21(a) présente un maximum en début de transformation. Le deuxième, figure 2.21(c), présente quant à lui une évolution croissante monotone pendant le changement de phase. Enfin, une troisième famille, figure 2.21(b), contient un type intermédiaire présentant un maximum local en début de transformation, puis une évolution monotone.

Tenant compte des caractéristiques de ϵ_N , la présence d'un maximum peut s'interpréter comme la conséquence du passage du front dans la zone concernée. Cette hypothèse permet d'interpréter la première famille de notre typologie.

Pour interpréter la famille à évolution monotone, rappelons l'une des hypothèse faite dans [VAL 07]. Dans cet article, nous avons utilisé l'hypothèse physique que pour des topologies simples, lors du changement de phase, il existe un seuil à partir duquel la déformation dans la phase mère est limitée en raison de son confinement dans la phase fille. Suivant cette hypothèse,

la famille monotone serait ainsi le résultat du passage de ce seuil, c'est à dire des zones transformées en dernier lors du changement de phase, condamnées à présenter une déformation faible tant qu'elles ne sont pas passées dans la phase fille.

Enfin, pour justifier l'existence de la famille intermédiaire, il faut tenir compte de l'homogénéisation réalisée implicitement en premier lieu par la corrélation numérique d'image et en second lieu par l'obtention du champ de déformation. Il est en effet remarquable que la famille intermédiaire semble être plus une composition des deux premières familles qu'une évolution complètement différente.

Se plaçant sous les hypothèses précédentes, nous pouvons alors imaginer reconstruire l'évolution des phases, au moins en début de transformation, en identifiant les maximums. Ainsi, sous le postulat que la norme ε_N est maximale lors du passage du front, nous avons construit le champ défini par :

$$\forall \underline{M} \in \mathcal{Z}, H_{\varepsilon}^{T_S}(\underline{M}, t) = \begin{cases} 0 & \text{if } t < t_M^{T_S} \\ 1 & \text{else} \end{cases} \quad (2.7)$$

où $t_M^{T_S}$ est le temps pour lequel ε_N au point \underline{M} , et pour une température supérieure au seuil T_S , est maximum.

La représentation de ce champ est donnée sur la figure 2.23. Par ailleurs, la figure 2.22 donne la proportion de phase obtenue par cette méthode, pour différentes températures seuil, en comparaison de la proportion de phase obtenue directement par le champ de déformation moyen.

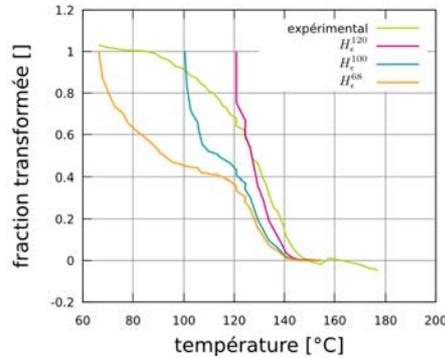


FIG. 2.22 – Comparaison entre les fractions de phase transformée.

Pour des pourcentages de phase transformée inférieur à 50%, le champ H_{ε}^{120} donne une approximation correcte de la fraction transformée. Ce champ représente une sorte de limite basse de la fraction de phase transformée obtenible par cette méthode. En effet, lorsque T_S augmente, pour les points significatifs, la fraction de phase évolue peu.

Pour une autre situation extrême, c'est à dire H_{ε}^{68} , où seuls sont pris en compte les maximums globaux, nous avons un 'manque' de phase transformée. Cela montre qu'il est important de prendre en compte les maximums locaux dans la comptabilisation de phase transformée. La justification de l'existence du type intermédiaire peut alors trouver une autre explication. Ainsi, pour cette famille, les zones subiraient effectivement le changement de phase en début de transformation, puis elles subiraient une déformation plus grande que leur précédent maximum du à la transformation

2. Caractérisation expérimentale de changement de phase

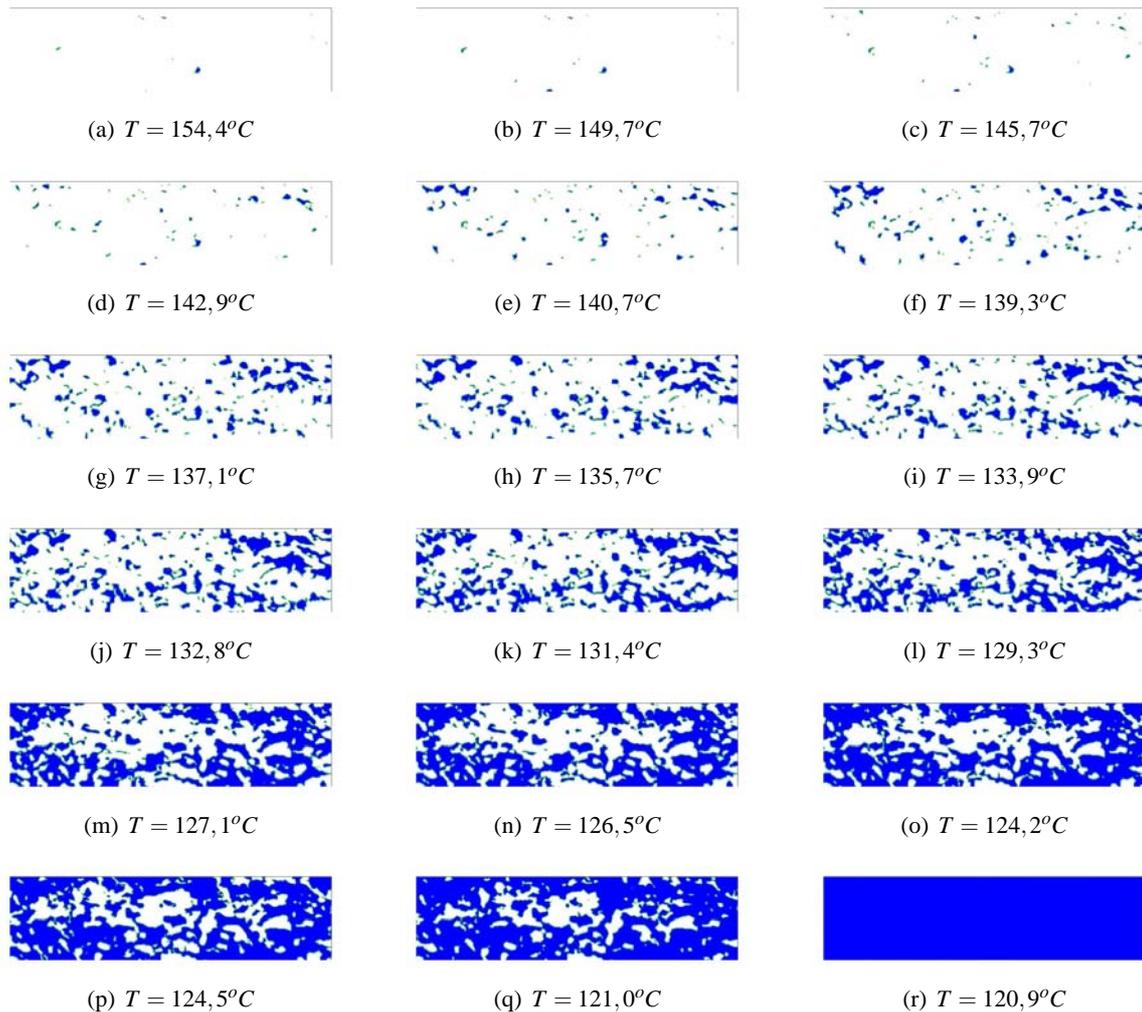


FIG. 2.23 – Champ H_{ϵ}^{120} pendant le changement de phase martensitique.

d'une zone voisine. Le maximum obtenu en début de transformation ne serait donc plus global sur l'ensemble du changement de phase.

Sous l'acceptation des hypothèses et interprétations précédentes, les figures 2.23(a) à 2.23(n) représenteraient alors la topologie du changement de phase de 0% à environ 50% de phase transformée.

Il est intéressant de remarquer qu'à partir de la figure 2.23(n), la phase mère est quasiment complètement incluse dans la phase fille. Cette constatation appuie les interprétations réalisées sur l'origine de la typologie en deux familles. Ce serait ainsi effectivement le confinement, et donc la limitation par contrainte hydrostatique, qui expliquerait le passage d'une famille à l'autre.

2.4 Conclusions - perspectives

Nous avons montré au cours de ce chapitre la conception, réalisation et l'utilisation d'un nouveau moyen d'investigation de changement de phase allotropique. Les résultats obtenus, conduisant, sous des hypothèses physiques à la détermination de la topologie des phases pendant la transformation, montrent la viabilité de la démarche entreprise.

Ensuite, l'utilisation du banc d'essai, uniquement au refroidissement, a permis de montrer l'existence de deux types de déformations caractéristiques pendant le changement de phase, rejoignant une hypothèse faite plus tôt dans [VAL 07]. Nous avons ainsi effectivement montré que les notions de phase dure et phase molle utilisées pour justifier que seule une phase est digne d'intérêt lors de la modélisation de l'état mécanique pendant un changement de phase allotropique perdent leur sens. Il ne faut donc pas s'occuper uniquement des propriétés mécaniques *stricto sensu* mais prendre aussi en considération l'état de confinement amenant un état de contrainte hydrostatique limitant pour les déformations.

D'autre part, sous l'hypothèse que le maximum de la norme ϵ_N correspond au passage du front de changement de phase, nous avons montré la reconstitution de la topologie du changement de phase jusqu'à environ 45% de phase transformée.

L'un des principaux frein dans l'affirmation de ces résultats est l'absence de vérification par d'autres moyens d'investigation. L'avenir consiste donc à essayer de confirmer ces résultats avec des résolutions plus fine, autant spatiales, microscope longue distance, que temporelles, caméra rapide, permettant de minimiser l'influence de l'homogénéisation de corrélation.

Enfin, la réalisation d'observations en thermographie infrarouge s'appuyant sur la chaleur dissipée lors du passage de la transformation laisse envisager un moyen d'identification supplémentaire du changement de phase.

Pour réaliser des observations au chauffage, il est nécessaire de filtrer avant acquisition pour empêcher la saturation du capteur de caméra. Cependant ce filtrage sera sans doute insuffisant. Lorsque le matériau se dilate, les rayures et irrégularités en surfaces se lissent, supprimant toute texture pour réaliser la corrélation. L'utilisation de peintures haute température pourrait permettre de surmonter ces obstacles. Là encore, on peut imaginer que l'utilisation de thermographie infrarouge donne une vision complémentaire sur le changement de phase.

Lorsque ces méthodes seront validées, il sera intéressant d'étudier l'influence du chargement et de sa variation sur l'évolution du changement de phase.

Chapitre 3

Comportement intrinsèque des phases

L'approche expérimentale a démontré la pertinence d'une description mésoscopique du changement de phase allotropique. Nous conserverons cette même échelle pour l'approche numérique du problème. Pour cela, nous devons en premier lieu définir le comportement matériel -élasto-plastique et thermique- d'une phase prise isolément.

Sommaire

3.1	Éléments de théorie plastique	40
3.2	Discrétisation de la théorie plastique	42
3.3	Association du chargement thermique au changement de densité	46
3.4	Conclusion	46

3.1 Éléments de théorie plastique

Surface de charge

Pour les métaux, le domaine de déformation se décompose en deux types dépendants du comportement : les domaines élastiques et plastiques. La déformation élastique est caractérisée par la déformation du réseau cristallin, c'est un mécanisme réversible et linéaire. Mais lorsque la contrainte devient trop importante, un autre mécanisme prend place, le mouvement et la coalescence de défauts d'arrangement au sein du réseau, les dislocations. La déformation engendrée par le mouvement des dislocations est irréversible et généralement non-linéaire, c'est la déformation plastique.

La transition du comportement élastique réversible au comportement plastique peut-être décrit par une fonction f représentant une surface de charge telle que :

$$f(\underline{\underline{\sigma}}) \leq 0 \quad (3.1)$$

L'état du matériau est ainsi limité suivant :

$$f(\underline{\underline{\sigma}}) < 0, \text{ état élastique} \quad (3.2)$$

$$f(\underline{\underline{\sigma}}) = 0, \text{ état plastique} \quad (3.3)$$

La perte de bijectivité de la loi de comportement due à l'irréversibilité de la déformation plastique oblige à travailler non plus sur le déplacement et la contrainte mais sur leur variation. Ainsi, à partir de l'équation 3.3, l'équation de cohérence de Prager obtenue par dérivation sur un temps virtuel notée $\dot{\cdot}$ s'écrit :

$$\dot{f} = 0, \text{ état plastique} \quad (3.4)$$

Physiquement, cette équation implique que pour avoir existence d'un écoulement plastique, la limite élastique doit non seulement être atteinte, mais de plus être conservée, ne serait ce que pendant un instant.

Pour les matériaux métalliques, et pour des températures suffisamment faibles devant la température de fusion, cette fonction ne dépend que des invariants du tenseur des contraintes. Dans ce travail nous utiliserons le critère de von Mises, bien adapté pour décrire le comportement plastique des métaux, et qui s'exprime par :

$$f(\underline{\underline{\sigma}}) = \sqrt{3J_2} - \tilde{\sigma} \quad (3.5)$$

où J_2 désigne le second invariant du déviateur tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$, et $\tilde{\sigma}$ la limite élastique.

Dérivation des équations caractéristiques

Pour dériver les équations de comportement élasto-plastique, il convient, sous l'hypothèse des petites déformations, de séparer les contributions élastiques et plastiques à la déformation :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^p \quad (3.6)$$

Le comportement élastique est entièrement déterminé *via* :

$$\underline{\underline{\sigma}}^e = \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{\varepsilon}}^e = \underline{\underline{A}}^e : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{\varepsilon}}^p) \quad (3.7)$$

où $\underline{\underline{\sigma}}^e$ est le tenseur de contrainte élastique, et $\underline{\underline{A}}^e$ le tenseur de comportement élastique.

La dérivation des équations de comportement élasto-plastique se fait à partir de la variation de contrainte dès lors que la limite élastique est atteinte, nous postulerons que la variation du tenseur des déformations, $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^p$, est colinéaire d'un tenseur d'orientation de l'écoulement plastique, $\underline{\underline{m}}$, soit, *via* un scalaire, le multiplicateur plastique, donnant l'intensité de l'écoulement, $\dot{\lambda}$:

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^p = \dot{\lambda} \underline{\underline{m}} \quad (3.8)$$

En prenant compte que la fonction de charge dépend uniquement du tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$, la condition de cohérence 3.4 prend la forme :

$$\underline{\underline{n}}_\sigma : \underline{\underline{\dot{\sigma}}} = 0, \text{ avec, } \underline{\underline{n}}_\sigma = \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \quad (3.9)$$

Finalement, la combinaison des trois précédentes équations permet d'identifier le multiplicateur plastique :

$$\dot{\lambda} = \frac{\underline{\underline{n}}_\sigma : \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}}{\underline{\underline{n}}_\sigma : \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}}} \quad (3.10)$$

Alors l'expression linéarisée du comportement plastique pour les variations de contrainte et de déformation s'écrit :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \left[\underline{\underline{A}}^e - \frac{\underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}} \underline{\underline{n}}_\sigma : \underline{\underline{A}}^e}{\underline{\underline{n}}_\sigma : \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}}} \right] : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad (3.11)$$

Il reste par ailleurs à déterminer la direction de l'écoulement plastique, $\underline{\underline{m}}$, ce qui ne peut être fait que depuis des assertions expérimentales raisonnables, particulièrement l'hypothèse de Drucker : *pendant un cycle de chargement-déchargement d'un incrément de contrainte le travail exercé par les forces externes est positif ou nul.*

De cette hypothèse dérive la règle, dite d'écoulement normal, exprimant la colinéarité entre la variation de déformation et la normale à la surface de charge :

$$\underline{\underline{m}} = \mu \underline{\underline{n}}_\sigma \quad (3.12)$$

où μ est un scalaire indéterminé.

A ce stade, l'ensemble du comportement élasto plastique d'un matériau répondant au critère de von Mises est déterminé.

Matériau plastique écrouissable

La théorie plastique présentée aux paragraphes précédents s'intéresse à des matériaux dont la surface de charge ne dépend que de l'état de contrainte et non de l'état de déformation. Ce comportement n'est pas toujours représentatif du phénomène de plastification, en particulier dans les milieux cristallins où la coalescence des dislocations à l'origine de la plasticité se traduit théoriquement par la modification de la surface de charge en fonction de l'état de déformation plastique, phénomène appelé écrouissage.

La modification de la surface de charge peut-être soit isotrope, une modification de son rayon -pour le critère de plasticité associé-, soit cinématique, un déplacement du centre de la surface de

charge. L'écroûissage cinématique nécessite la définition d'un tenseur représentatif $\underline{\underline{\kappa}}$ du mouvement du centre de la surface de charge. Pour l'écroûissage isotrope, seul un module d'écroûissage κ est nécessaire pour représenter la modification de la limite élastique.

Dans un souci de simplicité, ce paragraphe est écrit pour un modèle d'écroûissage isotrope. La définition de la surface de charge dépendante de cet écroûissage s'exprime par :

$$f = f(\underline{\underline{\sigma}}, \kappa) \quad (3.13)$$

L'introduction d'un paramètre d'écroûissage modifie la relation de cohérence de Prager 3.4 :

$$\underline{\underline{n}}_{\underline{\underline{\sigma}}} : \underline{\underline{\dot{\sigma}}} - h \dot{\lambda} = 0 \quad (3.14)$$

où, grâce à la nécessaire positivité du multiplicateur plastique, le module d'écroûissage h est défini par :

$$h = - \frac{1}{\dot{\lambda}} \frac{\partial f}{\partial \kappa} : \dot{\kappa} \quad (3.15)$$

En reproduisant le raisonnement du paragraphe précédent, la nouvelle relation entre la variation de contrainte et la variation de déformation s'obtient sous la forme :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}} = \left[\left(\underline{\underline{A}}^e \right)^{-1} + \frac{1}{h} \underline{\underline{m}} \underline{\underline{n}}_{\underline{\underline{\sigma}}} \right] : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} \quad (3.16)$$

Cette relation peut-être inversée de façon à déterminer la raideur de comportement élasto-plastique :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}} = \left[\underline{\underline{A}}^e - \frac{\underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}} \underline{\underline{n}}_{\underline{\underline{\sigma}}} : \underline{\underline{A}}^e}{h + \underline{\underline{n}}_{\underline{\underline{\sigma}}} : \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}}} \right] : \underline{\underline{\dot{\sigma}}} \quad (3.17)$$

De cet relation de comportement, nous constatons que le module d'écroûissage est pleinement déterminé dès que la surface de charge, la loi d'écroûissage, et la règle d'écoulement sont connues.

3.2 Discrétisation de la théorie plastique

Les éléments de théories plastiques présentés aux paragraphes précédents vont être utilisés ici pour construire un algorithme permettant les calculs élasto-plastiques en contrainte-plane. Le type d'algorithme réalise un calcul itératif en deux temps, tout d'abord la détermination de la déformation *via* un calcul d'équilibre sur le résidu, puis la détermination de l'état de contrainte associé, jusqu'à la minimisation du résidu.

Algorithme élasto-plastique

nous présentons ici une méthode proposée par de Borst [BOR 91]. Sous une forme générale, l'équation d'équilibre totale à résoudre aux noeuds s'écrit :

$$\int_{\Omega} \mathbf{B}^T \sigma_n \, dV = \mathbf{f}_e \quad (3.18)$$

où \mathbf{B} est la matrice gradient des fonctions de forme et \mathbf{f}_e le vecteur nodal des efforts extérieurs.

La contrainte, σ_n , mise à jour à la fin du pas de chargement n , s'écrit, sous forme linéarisée :

$$\sigma_n = \sigma_{n-1} + \mathbf{D}_n d\epsilon_n \quad (3.19)$$

où $d\epsilon_n$ est l'incrément de déformation plastique lors de l'itération n .

Le chargement thermique est pris en compte par l'initialisation de σ suivant :

$$\sigma_0 = \sigma_0 - c_\bullet \tau \mathbf{Id} \quad (3.20)$$

où c_\bullet est le coefficient thermique de la phase \bullet , \mathbf{Id} le tenseur identité sous forme nodale -dilatation isotrope, et τ la variation de température par rapport au pas précédent.

La matrice \mathbf{D}_n est la linéarisation cohérente tangente du module élasto-plastique calculée au début de l'itération n . En fonction des variables plastiques, elle est donnée par :

$$\underline{\underline{D}} = \underline{\underline{H}} - \frac{\underline{\underline{H}} : \underline{\underline{m}} n_\sigma : \underline{\underline{H}}}{h + n_\sigma : \underline{\underline{H}} : \underline{\underline{m}}} \quad (3.21)$$

où $\underline{\underline{H}}$, matrice pseudo-élastique, et $\underline{\underline{m}}$, sont définis par [BOR 90] :

$$\underline{\underline{H}} = \left(\underline{\underline{Id}} + \Delta\lambda \underline{\underline{A}}^e : \frac{\partial \underline{\underline{m}}}{\partial \underline{\underline{\sigma}}} \right)^{-1} : \underline{\underline{A}}^e \quad (3.22)$$

$$\underline{\underline{m}} = \underline{\underline{m}} + \Delta\lambda \frac{\partial \kappa}{\partial \lambda} \frac{\partial \underline{\underline{m}}}{\partial \kappa} \quad (3.23)$$

La suite du travail nécessite de partitionner les vecteurs contrainte et déformation généralisés en une partie plane et une partie normale :

$$\sigma = [\hat{\sigma}, \sigma_{zz}]^T \quad (3.24)$$

$$\epsilon = [\hat{\epsilon}, \epsilon_{zz}]^T \quad (3.25)$$

Pour utiliser ces vecteurs partitionnés, il convient de définir le module élasto-plastique sous la forme :

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_{11} & \mathbf{D}_{12} \\ \mathbf{D}_{21} & D_{22} \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

Sur la partie plane, l'équation d'équilibre d'équilibre totale se ré-écrit alors :

$$\int_{\Omega} \hat{\mathbf{B}}^T \hat{\sigma}_n dV = \hat{\mathbf{f}}_e \quad (3.27)$$

Le modèle développé ici ne considère que des chargements plans, d'où, $\hat{\mathbf{f}}_e = \mathbf{f}_e$, et, $\hat{\mathbf{B}}$ contient les trois premiers rangs de \mathbf{B} . La relation d'itération sur la contrainte, 3.19, se ré-écrit quant à elle :

$$\begin{bmatrix} \hat{\sigma} \\ \sigma_{zz} \end{bmatrix}_n = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_{11} & \mathbf{D}_{12} \\ \mathbf{D}_{21} & D_{22} \end{bmatrix}_n \begin{bmatrix} d\hat{\epsilon} \\ d\epsilon_{zz} \end{bmatrix}_n + \begin{bmatrix} \hat{\sigma} \\ \sigma_{zz} \end{bmatrix}_{n-1} \quad (3.28)$$

La condition de contrainte hors plan nulle permet de déduire immédiatement la déformation hors plan :

$$(d\epsilon_{zz})_n = -(D_{22})_n^{-1} [(\mathbf{D}_{21})_n d\hat{\epsilon}_n + (\sigma_{zz})_{n-1}] \quad (3.29)$$

Le remplacement de l'expression précédente dans l'équation 3.28 permet alors d'obtenir une expression correcte du module élasto-plastique ainsi que du vecteur des forces internes pour une simulation contrainte plane partir des données de la simulation en déformation plane :

$$\hat{\sigma}_n = \left[\mathbf{D}_{11} - \frac{\mathbf{D}_{12}\mathbf{D}_{21}}{D_{22}} \right]_n d\hat{\varepsilon}_n + \hat{\sigma}_{n-1} - \left(\frac{\mathbf{D}_{12}}{D_{22}} \right)_n (\sigma_{zz})_{n-1} \quad (3.30)$$

Reportant cette expression de la contrainte à l'itération n dans l'équation d'équilibre sur la partie plane nous obtenons :

$$\mathbf{K}_n d\mathbf{u}_n = \mathbf{f}_e - \hat{\mathbf{f}}_i \quad (3.31)$$

où la matrice de rigidité et le vecteur des forces internes sont définis par :

$$\mathbf{K}_n = \int_{\Omega} \hat{\mathbf{B}} \left[\mathbf{D}_{11} - \frac{\mathbf{D}_{12}\mathbf{D}_{21}}{D_{22}} \right]_n \hat{\mathbf{B}} dV \quad (3.32)$$

$$\text{et, } (\hat{\mathbf{f}}_i)_n = \int_{\Omega} \hat{\mathbf{B}} \left[\hat{\sigma}_{n-1} - \left(\frac{\mathbf{D}_{12}}{D_{22}} \right)_n (\sigma_{zz})_{n-1} \right] dV \quad (3.33)$$

Pour conserver la convergence du calcul, il est nécessaire de calculer le vecteur des forces internes après la détermination du nouveau module élasto-plastique tangent. D'une façon globale, l'algorithme 1 résume le calcul réalisé.

Algorithm 1 Algorithme pour le calcul élasto-plastique non-linéaire en contrainte plane.

Require: $\hat{\mathbf{f}}_e$

repeat

$$(\hat{\mathbf{f}}_i)_n \leftarrow \int_{\Omega} \hat{\mathbf{B}} \left[\hat{\sigma}_{n-1} - \left(\frac{\mathbf{D}_{12}}{D_{22}} \right)_n (\sigma_{zz})_{n-1} \right] dV$$

$$\mathbf{K}_n \leftarrow \int_{\Omega} \hat{\mathbf{B}} \left[\mathbf{D}_{11} - \frac{\mathbf{D}_{12}\mathbf{D}_{21}}{D_{22}} \right]_n \hat{\mathbf{B}} dV$$

$$d\mathbf{u}_n = \mathbf{K}_n^{-1} [\hat{\mathbf{f}}_e - (\hat{\mathbf{f}}_i)_n]$$

$$d\hat{\varepsilon}_n \leftarrow \hat{\mathbf{B}} d\mathbf{u}_n$$

$$(d\varepsilon_{zz})_n \leftarrow -(D_{22})_n^{-1} [(\mathbf{D}_{21})_n d\hat{\varepsilon}_n + (\sigma_{zz})_{n-1}]$$

$$\varepsilon_n \leftarrow \varepsilon_{n-1} + d\varepsilon_n$$

$$\sigma_n \leftarrow \sigma_n(\varepsilon_n, \dots)$$

until $\|\mathbf{f}_e - \hat{\mathbf{f}}_i\| < \delta_0$

Algorithme de retour radial

La seconde étape d'un calcul élasto-plastique est la détermination de l'état de contrainte admissible au sens de la loi de comportement. La perte de bijectivité de la relation de comportement dans l'état plastique contraint en effet à considérer le chemin de chargement complet et pas seulement l'état actuel.

Soit $\underline{\underline{\sigma}}_0$ la contrainte au début du pas de chargement, et $\Delta \underline{\underline{\varepsilon}}$ l'incrément de déformation de l'itération courante du calcul élasto-plastique. Nous considérerons par ailleurs le cas le plus général, c'est à dire un matériau initialement élastique, $f(\underline{\underline{\sigma}}_0, \kappa_0) < 0$.

Dans le domaine plastique, l'équation de comportement 3.16 permet d'obtenir la variation de contrainte en fonction de la variation de déformation. Au plus simple, une discrétisation *via* un

schéma d'Euler explicite de cette relation donne :

$$\Delta \underline{\underline{\sigma}} = \left[\begin{array}{c} \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}} \underline{\underline{n}}_{\sigma} : \underline{\underline{A}}^e \\ \underline{\underline{A}}^e - \frac{\underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}} \underline{\underline{n}}_{\sigma} : \underline{\underline{A}}^e}{h + \underline{\underline{n}}_{\sigma} : \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}}} \end{array} \right] : \Delta \underline{\underline{\epsilon}} \quad (3.34)$$

La première étape pour déterminer la nouvelle contrainte consiste à réaliser une estimation élastique de l'état du système en calculant une estimation de la contrainte élastique, $\Delta \underline{\underline{\sigma}}^e$ via :

$$\Delta \underline{\underline{\sigma}}^e = \underline{\underline{A}}^e d \underline{\underline{\epsilon}}_n, \quad \underline{\underline{\sigma}}^e = \underline{\underline{\sigma}}_0 + \Delta \underline{\underline{\sigma}}^e \quad (3.35)$$

A ce stade, l'état du système -élastique ou plastique- dépend du respect de la relation $f(\underline{\underline{\sigma}}^e, \kappa_0) < 0$. Si cette relation est vérifiée, le point considéré est élastique. Dans le cas contraire, il convient de pouvoir estimer les déformations plastiques et élastiques, ainsi que les états de contrainte et d'écrouissage. Pour cela, il faut tout d'abord estimer la contrainte de contact définie par :

$$\begin{cases} f(\underline{\underline{\sigma}}_c, \kappa_0) = 0 \\ \underline{\underline{\sigma}}_c = (\underline{\underline{\sigma}}^e - \underline{\underline{\sigma}}_0) \xi, \quad \xi \text{ quelconque} \end{cases}$$

Pour une fonction de charge donnée, ξ peut-être déterminé analytiquement comme la solution du système :

$$\begin{cases} f((\underline{\underline{\sigma}}^e - \underline{\underline{\sigma}}_0) \xi, \kappa_0) = 0 \\ \xi \in [0; 1] \end{cases} \quad (3.36)$$

Si la surface de charge est décrite par un critère de von Mises, l'équation 3.36 est un polynôme d'ordre 2 en ξ .

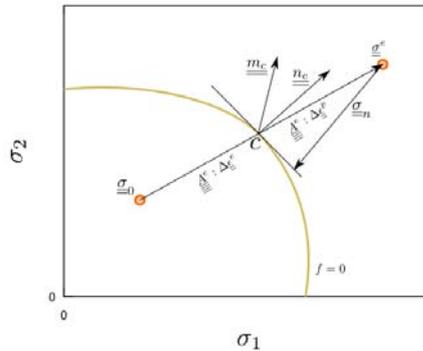


FIG. 3.1 – Schématisation de l'algorithme de retour radial dans le plan des contraintes principales (σ_1, σ_2) .

La détermination du point de contact permet alors d'estimer la partie élastique, $\Delta \underline{\underline{\epsilon}}^e$ et plastique, $\Delta \underline{\underline{\epsilon}}^p$, de l'incrément de déformation :

$$\Delta \underline{\underline{\epsilon}}^e = \xi \Delta \underline{\underline{\epsilon}} \quad (3.37)$$

$$\Delta \underline{\underline{\epsilon}}^p = (1 - \xi) \Delta \underline{\underline{\epsilon}} \quad (3.38)$$

L'expression de la relation de comportement 3.17 au point de contact \underline{C} (cf. fig. 3.1) permet alors de déterminer la correction à apporter à l'estimation élastique du tenseur des contraintes $\underline{\underline{\sigma}}^e$:

$$\underline{\underline{\sigma}}^n - \underline{\underline{\sigma}}^e = -\Delta\lambda \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}}^c, \text{ avec, } \Delta\lambda = \frac{\underline{\underline{n}}_c^c : \underline{\underline{A}}^e : \Delta\underline{\underline{\varepsilon}}^p}{h^c + \underline{\underline{n}}_c^c : \underline{\underline{A}}^e : \underline{\underline{m}}^c} \quad (3.39)$$

$\Delta\lambda$ représente la quantité d'écoulement plastique propre au pas de chargement.

3.3 Association du chargement thermique au changement de densité

D'une façon générale, le comportement élasto-plastique de la phase κ lors du problème de changement de phase peut se mettre sous la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{A}}_\kappa : \underline{\underline{\varepsilon}} - c_\kappa I d\tau \quad (3.40)$$

$$\rho = \rho(\tau) \quad (3.41)$$

où c_\bullet désigne le coefficient thermique, associé au coefficient de dilatation k_\bullet .

Dans le modèle éléments finis adopté, les éléments sont implicitement de masse constante. Le changement de phase ne peut donc se traduire dans cette modélisation par un changement de masse de l'élément. Le changement de densité se traduit donc pour nous par l'utilisation d'un coefficient de dilatation non linéaire pour la phase qui n'existe pas sur la configuration initiale du calcul.

Lors du calcul avec changement de phase, il faudra donc considérer trois matériaux possibles différents par leur coefficient de dilatation. Les deux premiers seront les phases déjà transformée ou pas encore transformée, le troisième sera le matériau en cours de transformation. Le matériau 'numérique' en cours de transformation doit à la fois subir le chargement lié à la différence de compacité à la température de référence mais en plus le chargement lié à la différence de dilatation entre les deux phases entre les températures de référence et actuelle.

L'obtention du coefficient de dilatation en cours de transformation est explicité sur la figure 3.2. La température T_{ref} est la température de début au début de la simulation, donc pour un état libre de contrainte. En fonction de la différence de compacité à la température T_{ref} , $\Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{T_{ref}}$, et pour une transformation de la phase α vers γ , le coefficient de dilatation au pas n , $k_{\alpha\gamma}^n$ à utiliser est défini par :

$$(T_n - T_{n-1})k_{\alpha\gamma}^n = (T_n - T_{ref})k_\alpha + \Delta\varepsilon_{\alpha\gamma}^{T_{ref}} - (T_{n-1} - T_{ref})k_\gamma \quad (3.42)$$

L'utilisation d'un coefficient de dilatation particulier pour le matériau en cours de transformation permet ainsi de tenir compte de la variation de densité lors du changement de phase.

3.4 Conclusion

La méthode de calcul d'équilibre élasto-plastique, en conjonction avec la méthode de retour radial, présentés ici, permettront par la suite de calculer en contrainte plane la déformation issue du chargement thermique. Ensuite, l'utilisation de coefficients de dilatation non-linéaires permettront de représenter l'apparition d'une phase de densité différente.

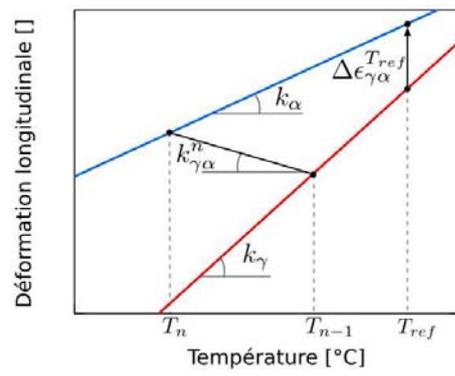


FIG. 3.2 – Coefficients de dilatation pour une transformation de la phase γ vers la phase α .

Chapitre 4

Discrétisation du problème de changement de phase

La discrétisation mécanique d'un changement de phase allotropique, revient, compte tenu de l'échelle descriptive adoptée, à modéliser un champ de déplacement faiblement discontinu. De part ses performances, la méthode des éléments finis étendus a été choisie pour discrétiser le problème mécanique. Mais il faut fournir, pour son utilisation, une modélisation géométrique du front. La méthode level set de modélisation d'hyper-surfaces -habituellement discrétisée en différences finies- à ainsi été traitée en éléments finis. Un exemple représentatif de l'état du 16MND5 à chaud montre finalement l'évolution de l'état mécanique pendant le changement de phase.

Sommaire

4.1	Modélisation numérique de discontinuités	51
4.1.1	Modélisation numérique de champs discontinus	51
4.1.2	Modélisation des surface de discontinuité : méthode level-set	53
4.2	Méthode level set discrétisée par éléments finis	55
4.2.1	Initialisation à partir d'une image numérique	56
4.2.2	Initialisation du champ level set à norme de gradient constante	56
4.2.3	Relier l'étape d'initialisation à la propagation du front	58
4.2.4	Algorithme global	59
4.2.5	Illustration	59
4.3	Problème mécanique à l'interface	63

4.4	Exemple de propagation : changement de phase diffusif dans le 16MND5	65
4.4.1	Caractéristiques de la simulation	65
4.4.2	Evolution de la contrainte et du déplacement	67
4.5	Conclusions-perspectives	67

4.1 Modélisation numérique de discontinuités

Le problème mécanique présenté dans la section 1.3 montre que la modélisation mécanique de changement de phase dans le cadre de la mécanique des milieux continus doit prendre en compte une possible discontinuité faible du champ de déplacement.

4.1.1 Modélisation numérique de champs discontinus

Méthode des éléments finis

Dans le cadre classique de la méthode des éléments finis, la discrétisation spatiale d'un domaine Ω est réalisée par un ensemble \mathcal{N} de N noeuds. Sur cet ensemble de noeuds, s'appuie une famille de fonctions de forme N_i avec $i \in \mathcal{N}$. Ces fonctions de forme autorisent alors la discrétisation de l'inconnue du problème ainsi que des fonctions test de la formulation variationnelle du problème. Un champ discrétisé \bar{u} au point \underline{x} s'écrit alors

$$\bar{u} = \sum_{i \in \mathcal{N}} N_i(\underline{x}) u_i \quad (4.1)$$

\bar{u} définit une approximation éléments finis standard du champ u .

Pour la méthode des éléments finis, la discrétisation spatiale d'un champ présentant une discontinuité faible ne peut se faire que par un maillage explicite du support de la discontinuité. Si de plus cette discontinuité se propage, il faut effectuer un remaillage et une projection du champ de déplacement, et des variables d'histoire éventuelles, à chaque propagation. Cette approche peut entraîner une variation de l'énergie de déformation -pour un problème mécanique- lors de la reprojction, donc d'origine purement numérique [RÉT 04], sans compter une implantation *a priori* complexe.

Méthode des éléments finis étendus

Dans la méthode des éléments finis étendus, les fonctions de discrétisation sont modifiées pour capturer au mieux le problème physique. Cette méthode est issue de la méthode de partition de l'unité (Partition of Unity Method, PUM) développée par Babuška et Melenk[BAB 97]. La méthode de partition de l'unité permet de construire un espace de projection pour les inconnues et les fonctions tests tenant compte de la connaissance *a priori* de la forme de la solution. La fonction \bar{u} discrétisée précédente prend alors la forme :

$$\bar{u} = \sum_{i \in \mathcal{N}} N_i u_i + \sum_{(k,l) \in \mathcal{N} \times \mathcal{N}_e} N_k \hat{N}_{kl} \hat{u}_l \quad (4.2)$$

\mathcal{N}_e est l'ensemble des noeuds enrichis, \hat{N}_{kl} les enrichissements, et \hat{u}_l les degrés de liberté enrichis.

Dans [MOE 99, BEL 01], cette méthode est appliquée pour la description de frontières, éventuellement mobiles, au sein du média modélisé. Ces frontières internes peuvent se traduire physiquement par une fissure, un milieu hétérogène par morceaux, une inclusion, *etc.*

Dans ce cadre, la description d'une fissure est réalisée par une fonction Heaviside, la description de la frontière entre deux matériaux parfaitement adhérents par une fonction continue à gradient continu par morceaux.

Plus spécifiquement, pour la modélisation des problèmes de changement de phase, la propriété physique particulière à respecter est la discontinuité faible du champ de déplacement \underline{u} à l'interface entre les deux phases. *Via* l'exhibition d'une fonction distance signée d_ϕ de l'interface ϕ_0 , la

discrétisation X-FEM du problème de changement de phase allotropique s'écrit :

$$\forall x \in \Omega^\phi, \bar{u} = \mathbf{N}\underline{u} + \mathbf{N}|d_\phi| \hat{\mathbf{u}} \quad (4.3)$$

Cet enrichissement est effectif uniquement sur les noeuds du domaine Ω^ϕ , cependant les deux bandes d'élément de part et d'autre de Ω^ϕ sont elles aussi affectées par cet enrichissement ce qui peut conduire à l'introduction d'erreur sur la détermination du champ de déplacement. Ce problème est traité dans la section 4.3.

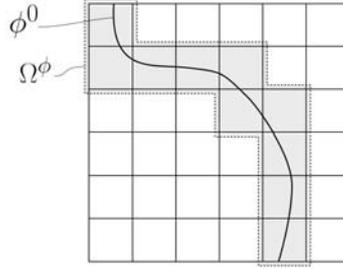


FIG. 4.1 – Éléments enrichis, Ω^ϕ , autour de l'interface ϕ^0 .

Intégration

Dans le cadre élément finis, l'intégration numérique de la formulation variationnelle constitutive du problème est généralement réalisée par un schéma d'intégration de Gauss-Legendre. Sous une forme général, il s'agit de calculer une intégrale définie S de la fonction f , au moins C^0 sur le domaine Ω par l'intermédiaire d'une somme telle que :

$$S(f) = \bar{S}(f) + \varepsilon \quad (4.4)$$

avec, $S(f) = \int_{\Omega} f(x) d\Omega$

et, $\bar{S}(f) = \sum_i w_i f(x_i), i \in \mathbb{N}^*, x_i \in \Omega, w_i \in \mathbb{R}^n$

où ε représente l'erreur d'intégration.

En s'appuyant sur les propriétés particulière des polynôme de Legendre, la quadrature définit par Gauss permet d'intégrer exactement un polynôme de degré $2k + 1$ avec k points d'intégration.

Lors de l'utilisation de fonctions d'enrichissement -la fonction f n'est plus que continue par morceaux- l'exactitude du schéma de Gauss est perdue. Il faut donc modifier la technique d'intégration pour en minimiser l'erreur.

Cependant, pour des fonctions C^0 , l'interpolation par des polynômes est impossible sur le support de la discontinuité. Alors, pour de telles fonctions, l'erreur d'intégration ε ne s'annule pas même pour un nombre très élevé de points d'intégration. D'autre part, il n'est pas évident que l'augmentation du nombre de points d'intégration soit le moyen le plus efficace pour diminuer l'erreur [VEN 06].

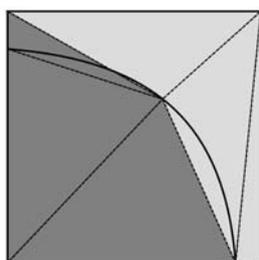
Une approche différente consiste à se concentrer sur la minimisation de l'erreur commise sur le support de la discontinuité. Pour cela le domaine d'intégration est sous-découpé en deux zones

distinctes, la première contenant le front I_ϕ , et la seconde le reste de l'élément considéré, \bar{I}_ϕ . L'intégration numérique de la fonction f s'écrit alors :

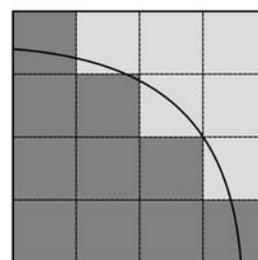
$$\begin{aligned} \bar{S}(f) = w_i f(x_i) + \bar{\epsilon}_\phi + w_k f(x_k) + \epsilon_\phi, \quad i \in \mathbb{N}^*, x_i \in \bar{I}_\phi, w_i \in \mathbb{R}^n, \\ k \in \mathbb{N}^*, x_k \in I_\phi, w_k \in \mathbb{R}^{\bar{n}} \end{aligned} \quad (4.5)$$

L'erreur d'intégration $\bar{\epsilon}_\phi$ peut être rendue nulle grâce à un choix adéquat des points de Gauss, tandis que l'erreur ϵ_ϕ diminue non seulement avec l'augmentation de points d'intégration mais aussi avec la diminution de la taille du domaine I_ϕ .

Reste à choisir un sous-découpage du domaine d'intégration. Deux stratégies existent, présentées sur la figure 4.2. La première consiste en un sous découpage conforme du domaine, suivant une approximation du support de la discontinuité. La seconde est un sous découpage régulier, indépendant du support de la discontinuité.



(a) Conforme au support de la discontinuité.



(b) Non conforme au support de la discontinuité.

FIG. 4.2 – Stratégies de sous-découpage.

La stratégie de sous découpage conforme présente l'avantage de diminuer rapidement l'erreur d'intégration sans augmenter démesurément le nombre de points de Gauss. Cependant pour les problèmes où le support de la discontinuité est susceptible d'évoluer, il faut effectuer un sous découpage à chaque propagation et une projection des variables d'histoire aux points de Gauss.

La stratégie de découpage non conforme n'entraîne pas de reprojection mais nécessite un nombre important de sous élément et un sous découpage *a priori* de tout le maillage lorsqu'il existe des variables d'histoire. Pour la modélisation envisagée, le comportement du matériau nécessitant des variables d'histoire, nous avons choisi une stratégie d'intégration non conforme évitant leur projection lors de la propagation du support de la discontinuité faible.

4.1.2 Modélisation des surface de discontinuité : méthode level-set

Contexte théorique

L'utilisation d'enrichissement nécessite la construction d'une fonction analytique s'appuyant sur la géométrie de la discontinuité. Il faut donc être capable de construire un modèle de géométrie et le manipuler. La voie la plus utilisée repose sur le modèle de fonction de niveaux (level set) proposé par Osher et Sethian [OSH 88, SET 99]. Cette méthode autorise aussi bien la représentation d'une hypersurface par l'iso-0 d'une fonction scalaire ϕ définie sur le domaine d'intérêt Ω que de la distance signée à l'hypersurface modélisée, cf figure 4.3.

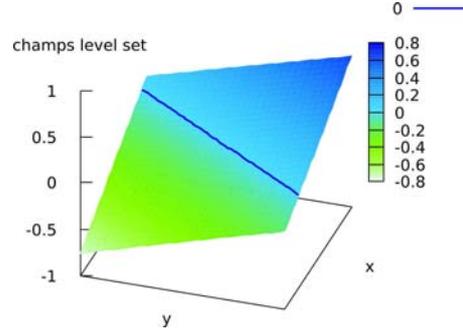


FIG. 4.3 – Représentation d’une hypersurface par la méthode level set pour un domaine Ω de dimension 2.

La fonction ϕ dépend du point matériel \underline{x} ainsi que du temps. D’un point de vue Lagrangien, et tenant compte que la valeur du champ level set attachée à la particule de chemin $\underline{x}(t)$ doit être constante, la stationnarité du champ s’écrit :

$$\frac{D\phi}{Dt} = 0 \iff \phi_{,t} + \underline{\nabla}\phi(\underline{x}(t), t) \cdot (\underline{x}(t))_{,t} = 0 \quad (4.6)$$

4.6 définit l’équation de propagation du front. En définissant la vitesse normale du front par V_n et en introduisant le champ de vitesse normale défini sur Ω par un champ scalaire quelconque égal à V_n sur le front, l’équation 4.6 devient :

$$(\underline{x}(t))_{,t} \cdot \underline{n} = V_n \quad (4.7)$$

$$\underline{n} = \frac{\underline{\nabla}\phi}{\|\underline{\nabla}\phi\|} \quad (4.8)$$

où \underline{n} représente la normale à l’iso-contour considéré.

Finalement, le système définissant la méthode level set s’écrit :

$$\begin{cases} \phi_{,t} + V_n \|\underline{\nabla}\phi\| = 0 \\ \phi(\underline{x}(t), t = 0) = f(\underline{x}) \text{ connu} \end{cases}$$

Sethian souligne que la propagation est d’autant plus correcte que la norme du gradient de la fonction level set est proche de 1. C’est donc une propriété supplémentaire implicite au schéma présenté ici.

Lors de la propagation d’un front, l’information de vitesse n’est *a priori* déterminée que sur le front, soit F la vitesse donnée. Il faut donc construire le champ V_n défini sur Ω . Sethian a montré que pour conserver la propriété de distance signée, il faut définir la vitesse étendue V_n via :

$$\forall \underline{M} \in \Omega - \phi_0, \underline{\nabla}V_n \underline{\nabla}\phi = 0 \quad (4.9)$$

$$\forall \underline{M} \in \phi_0, V_n = F \quad (4.10)$$

Cette extension du champ V_n ne conserve cependant pas la distance signée exactement. Ainsi il convient d’ajouter, lors de la propagation une étape d’initialisation à la distance signée du champ level set.

Historiquement, les schémas numériques développés pour la méthode level set appartiennent à la famille des différences finies. Cela présente un désavantage majeur lors de l'utilisation en conjonction avec un problème discrétisé par éléments finis. En effet il faut d'une part produire un deuxième maillage et d'autre part réaliser une projection entre le maillage différence finies et le maillage éléments finis. Pour s'affranchir de ces problèmes, nous avons développé au cours de cette thèse une approche numérique éléments finis de la méthode level set.

Discrétisation dans le cadre éléments finis

Récemment, Mourad a présenté une formulation élément fini concernant l'équation de propagation [MOU 05]. Cette formulation permet de surmonter les principaux problèmes rencontrés par [CHE 04] en simplifiant l'équation de propagation. Cette formulation sera utilisée par la suite dans le schéma élément finis complet. L'idée principale de la formulation présentée par Mourad est de réduire l'équation de propagation *via* l'hypothèse de constance de la norme du gradient du champ level set. Ainsi, l'équation de propagation se réécrit :

$$\forall \underline{x} \in \Omega, \begin{cases} \phi_{,t} + V_n = 0 \\ \phi(\underline{x}(t), t = 0) = f(\underline{x}) \text{ connu} \end{cases}$$

L'utilisation d'une discrétisation élément fini pour la description du champ scalaire level set conduit alors à l'équation de mouvement :

$$\mathbf{M} \phi_{,t,t} + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T V_e dV = \mathbf{0} \quad \text{avec, } \mathbf{M} = \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dV$$

ici, \mathbf{M} désigne la matrice de masse et \mathbf{N} le vecteur nodal des fonctions de forme.

Enfin, l'utilisation d'un schéma d'Euler à l'ordre 1 pour la discrétisation temporelle permet d'écrire l'équation d'évolution :

$$\phi_{,t,t} \simeq \frac{\phi_{t+\Delta t} - \phi_t}{\Delta t} \quad (4.11)$$

$$\phi_{t+\Delta t} = \phi_t - \Delta t \mathbf{M}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T V_e dV \quad (4.12)$$

4.2 Méthode level set discrétisée par éléments finis

Le travail de Mourad concernant l'équation de propagation résout une partie de la question de la modélisation level set éléments finis. Malgré tout, son approche n'englobe pas toutes les étapes nécessaires à l'utilisation de modèle level set de support de discontinuités.

La méthode présentée précédemment a ainsi été complétée par l'élaboration de schémas éléments finis permettant l'initialisation du champ level set à partir d'une image et la ré-initialisation du champ level set à la distance signée. Les principaux problèmes relatifs à cette dernière formulation sont, d'une part la nécessité de pouvoir imposer une condition limite sur un contour intérieur -conservation de l'iso-0 lors de la ré-initialisation- et la présence d'équations aux dérivées partielles de type hyperbolique, qui ne permettent pas d'écrire directement une formulation variationnelle du problème mais uniquement une formulation faible.

4.2.1 Initialisation à partir d'une image numérique

Afin de contrôler complètement le cycle de vie d'une discrétisation level set, il est souhaitable de pouvoir construire le champ initial de la condition limite en temps, $\phi(\underline{x}, t = 0)$. Nous supposons que cette construction sera effectuée à partir d'une image décrite par pixels en niveaux de gris. L'interface est alors définie comme une différence de contraste sur l'image. Dans un objectif pratique, l'image est ici réduite à une fonction scalaire à deux niveaux $P : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, définie par :

$$\forall \underline{x} \in \Omega, P(\underline{x}) = \begin{cases} \beta & \text{si } \underline{x} \text{ la valeur du pixel est supérieure à } s \\ -\beta & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.13)$$

où s est un seuil correspondant à la différence de niveau de gris entre les domaines séparés par le front, β un paramètre appartenant à $\mathbb{R}^+ *$ déterminé plus loin.

L'approche proposée ici ne se concentre pas sur l'interface elle-même mais plutôt sur la minimisation de la distance entre P et ϕ sur tout le domaine Ω . Ainsi, l'initialisation du champ ϕ est définie par :

$$\forall \underline{x} \in \Omega, \min_{\phi: \Omega \rightarrow \mathbb{R}} (\phi(\underline{x}) - P(\underline{x})) \quad (4.14)$$

La formulation variationnelle du problème s'écrit directement, ce qui amène le schéma élément fini associé :

$$\phi = \mathbf{M}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T P(\underline{x}) dV \quad (4.15)$$

Pour faciliter la production ultérieure d'un champ ϕ de norme de gradient constante, les deux valeurs portés par P sont reliées à la taille moyenne de l'élément sur le maillage, *i.e.* $\beta = \frac{H_e}{2}$, avec H_e la taille moyenne des éléments sur le maillage.

4.2.2 Initialisation du champ level set à norme de gradient constante

Ayant choisit d'utiliser la solution de Mourad pour la propagation du front par éléments finis, il faut être capable de produire un champ level set tel que $\|\nabla\phi = 1\|$, c'est à dire qu'il doit représenter la distance signée au front. Une contrainte supplémentaire est ajoutée sur l'iso-0 qui doit conserver sa position lors de la réinitialisation.

Les conditions locales à imposer pour obtenir un champ distance signée s'écrivent :

$$\|\nabla\phi\| = 1. \iff \nabla\phi \cdot \nabla\phi = 1. \quad (4.16)$$

$$\phi = 0., \forall \underline{x} \in \phi^0 \quad (4.17)$$

La linéarisation de l'équation 4.16 passe par l'utilisation d'un développement de Taylor au premier ordre par rapport à $\underline{\nabla}\phi_t$:

$$f(\underline{\nabla}\phi_t + \underline{\varepsilon}_\phi) \simeq f|_{\underline{\nabla}\phi_t} + f'|_{\underline{\nabla}\phi_t} \underline{\varepsilon}_\phi, \text{ avec, } f(\underline{\nabla}\phi_t) = (\underline{\nabla}\phi_t \underline{\nabla}\phi_t - 1) \quad (4.18)$$

Si le champ initialisé est suffisamment proche d'un champ distance signé, il est possible de construire un schéma itératif à partir de l'équation précédente. Alors, avec $\underline{\varepsilon}_\phi = \underline{\nabla}\phi_t^{k+1} - \underline{\nabla}\phi_t^k$, et à l'itération $k + 1$, le champ ϕ_t^{k+1} est tel que :

$$(2\underline{\nabla}\phi_t^k \underline{\nabla}\phi_t^{k+1}) = (\underline{\nabla}\phi_t^k \underline{\nabla}\phi_t^k + 1) \quad (4.19)$$

$$\phi_t^{k+1} = 0., \forall \underline{x} \in \phi^0 \quad (4.20)$$

Considérant \mathcal{U} l'espace des champs suffisamment régulier sur Ω - par exemple $H^1(\Omega)$ - la formulation faible du problème 4.19 est :

$$\forall \delta_\phi \in \mathbb{U}_{ad} = \{\phi \in \mathcal{U} | \phi = 0 \text{ sur } \phi^0\}, \text{ trouver } \phi_t^{k+1} \text{ tel que :} \quad (4.21)$$

$$2 \int_{\Omega} \delta_\phi \nabla \phi_t^k \nabla \phi_t^{k+1} dV = \int_{\Omega} \delta_\phi (\nabla \phi_t^k \nabla \phi_t^k + 1) dV \iff \quad (4.22)$$

$$a^k(\delta_\phi, \phi_t^{k+1}) = l^k(\delta_\phi) \quad (4.23)$$

L'une des difficultés pour résoudre ce problème est issue de la condition aux limites 4.17. Dans un cadre plus général, lorsque il est nécessaire d'imposer une condition aux limites, il faut réduire l'espace de projection sur le support de la condition. Dans le contexte éléments finis, les méthodes classiques consistent soit à supprimer des degrés de liberté, soit à utiliser des multiplicateurs de Lagrange, en particulier pour imposer des relations linéaires entre degrés de liberté.

L'absence de discrétisation explicite de l'iso-0 sur laquelle doit être imposé la condition aux limites 4.17 rend de telles méthodes inopérantes. Dans [MOE 06] une solution à ce problème est présentée. Cette dernière passe par l'utilisation de multiplicateurs de Lagrange, déterminer pour limiter la variation des degrés de libertés affectés par la condition aux limites.

Nous présentons ici une application nouvelle de la méthode des éléments finis étendus pour imposer une condition aux limites sur un contour interne. L'enrichissement utilisé est déterminé pour réduire l'espace de projection sur tout l'iso-0. Pour une quantité scalaire x , il s'écrit :

$$x \simeq \mathbf{N}\mathbf{x} = \underbrace{\mathbf{N}_u}_{\mathbf{0}} \mathbf{x}_u + \underbrace{\mathbf{N}_e}_{\mathbf{N}_{u\phi_t}} \mathbf{x}_e + \underbrace{\mathbf{N}_{e1}}_{\mathbf{N}_{u x_d}} \underbrace{\mathbf{x}_{e1}}_{\mathbf{1}} \quad (4.24)$$

l'indice u qualifie les quantités classiques alors que l'indice e qualifie les quantités enrichies. N_\bullet désigne de façon générale le vecteur nodal des fonctions de forme.

Ce type d'enrichissement induit la réduction de l'espace de projection sur le front puisque la seule valeur admissible pour le champ x à cet endroit est x_d . Le premier enrichissement permet d'imposer une valeur nulle, et, si l'ajout du deuxième enrichissement permet d'imposer la valeur souhaitée sur le front.

La condition 4.17 concernant uniquement l'imposition d'une valeur nulle, seul le premier enrichissement pour la discrétisation de l'étape de normalisation est conservé :

$$\phi \simeq \mathbf{N}_e \hat{\phi} = \mathbf{N}_{\phi_t} \hat{\phi} \quad (4.25)$$

$\hat{\phi}$ désigne la projection de ϕ sur cet espace particulier. L'enrichissement est utilisé uniquement sur la zone d'intérêt, c'est à dire sur les noeuds appartenant au domaine Ω^ϕ représenté sur la figure 4.4.

La forme faible 4.23 n'est pas complètement satisfaisante à cause de la non symétrie de la forme bilinéaire a . En effet, cette absence de symétrie empêche d'assurer l'unicité de la solution, et par voie de conséquence d'en exhiber une seule. Dans ce type d'équation, la solution du problème qui est physiquement intéressante est la solution dite entropique, obtenue par l'ajout d'un terme de diffusion dans l'équation. La méthode Galerkin Least Square -GLS- proposée par Hughes [HUG 89] permet d'estimer le coefficient multiplicatif associé à ce terme diffusif. C'est à dire :

$$\forall \delta_\phi \in \mathbb{U}_{ad} = \{\phi \in \mathcal{U} | \phi = 0 \text{ sur } \phi^0\}, \text{ trouver } \phi_t^{k+1} \text{ tel que :} \\ a(\delta_\phi, \phi_t^{k+1}) + a_{GLS}^k(\delta_\phi, \phi_t^{k+1}) = l(\delta_\phi) + l_{GLS}^k(\delta_\phi) \text{ avec,} \quad (4.26)$$

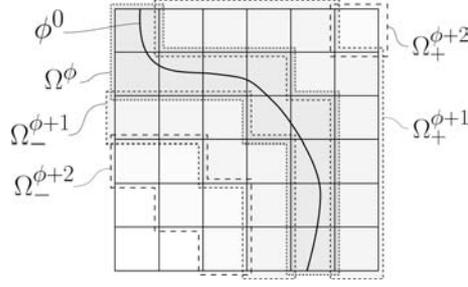


FIG. 4.4 – Noms des sous domaines du maillage autour de l'iso-0 ϕ^0 du champ level set. Par ailleurs, et en association, $\forall n \in \mathbb{N}^*$, $\Omega^{\phi+n} = \Omega_+^{\phi+n} \cup \Omega_-^{\phi+n}$.

$$\begin{aligned}
 d_{GLS}^k(\delta_\phi, \phi_t^{k+1}) &= \sum_{\mathcal{E}} \int_{\Omega_e} 2\nabla\phi_t^k \nabla\delta_\phi \tau^e 2\nabla\phi_t^k \nabla\phi_t^{k+1} \, dV \quad , \\
 l_{GLS}^k(\delta_\phi) &= \sum_{\mathcal{E}} \int_{\Omega_e} \nabla\delta_\phi 2\nabla\phi_k \tau^e (1 + \nabla\phi_k \nabla\phi_k) \, dV \quad \text{et,} \\
 \tau^e &= \frac{h_e}{|2\nabla\phi_t^k|}
 \end{aligned}$$

\mathcal{E} est l'ensemble des éléments du maillage et h_e la taille de l'élément considéré.

Utilisant la discrétisation 4.25, le problème 4.26 se réduit à :

$$(\mathbf{A}^k + \mathbf{A}_{GLS}^k) \widehat{\phi}_t^{k+1} = \mathbf{B}^k + \mathbf{B}_{GLS}^k \quad \text{avec,} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}^k &= \int_{\Omega} \mathbf{N}_e^T 2\nabla\mathbf{N}_e \widehat{\phi}_t^k \nabla\mathbf{N}_e \, dV \\
 \mathbf{A}_{GLS}^k &= \sum_{\mathcal{E}} \int_{\Omega_e} \nabla\mathbf{N}_e^T 2\nabla\mathbf{N}_e \widehat{\phi}_t^k \tau^e 2\nabla\mathbf{N}_e \, dV \\
 \mathbf{B}^k &= \int_{\Omega} \mathbf{N}_e^T (\nabla\mathbf{N}_e \widehat{\phi}_t^k \nabla\mathbf{N}_e \widehat{\phi}_t^k + 1) \, dV \\
 \mathbf{B}_{GLS}^k &= \sum_{\mathcal{E}} \int_{\Omega_e} \nabla\mathbf{N}_e^T 2\nabla\mathbf{N}_e \widehat{\phi}_t^k \tau^e (\nabla\mathbf{N}_e \widehat{\phi}_t^k \nabla\mathbf{N}_e \widehat{\phi}_t^k + 1) \, dV
 \end{aligned}$$

Ainsi il ne reste plus qu'à résoudre le problème 4.27 itérativement :

$$\widehat{\phi}_t^{k+1} = (\mathbf{A}^k + \mathbf{A}_{GLS}^k)^{-1} (\mathbf{B}^k + \mathbf{B}_{GLS}^k) \quad (4.28)$$

Le champ level set initial pour le calcul itératif, $\widehat{\phi}_t^0$, est le champ level set ϕ à l'instant t : $\widehat{\phi}_t^0 = \mathbf{1}$.

Le critère utilisé pour estimer la convergence est $|\|\nabla\phi\| - 1|$. La méthode est appliquée uniquement sur un sous domaine de Ω autour du front, c'est à dire le domaine $\bigcup_{i=0}^n \Omega^{\phi+i}$.

4.2.3 Relier l'étape d'initialisation à la propagation du front

L'étape d'initialisation présentée ci-avant est conduite par le biais d'un enrichissement sur le champ ϕ . Pour pouvoir être utilisé en conjonction avec le schéma de propagation, il est nécessaire

d'introduire une projection de la solution précédente sur l'espace classique non enrichi :

$$\forall \underline{x} \in \Omega, \min(\widehat{\phi}_t - \phi) \quad (4.29)$$

$\widehat{\phi}_t$ est la solution convergée à l'étape précédente.

Ce problème peut être écrit sous la forme discrétisée :

$$\phi = \mathbf{M}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \widehat{\phi}_t^n dV \quad (4.30)$$

En concaténant cette équation avec l'équation de propagation 4.12, il ne reste qu'à résoudre :

$$\phi_{t+\Delta t} = \mathbf{M}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T (\widehat{\phi}_t^n - \Delta t V) dV \quad (4.31)$$

En terme de programmation, cela la réalisation concomitante la projection et la propagation.

Algorithm 2 Algorithme pour la propagation du contour level set.

Require: $\forall \underline{x} \in \Omega, P(\underline{x})$ and $V_n(\underline{x})$ connu

$$\phi_{t=0} \leftarrow \mathbf{M}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T P(\underline{x}) dV$$

repeat

$$\widehat{\phi}_t^{k+1} \leftarrow (\mathbf{A}^k + \mathbf{A}_{GLS}^k)^{-1} (\mathbf{B}^k + \mathbf{B}_{GLS}^k)$$

until $\left| \|\nabla \widehat{\phi}_t^{k+1}\| - \|\nabla \widehat{\phi}_t^k\| \right| > \varepsilon$

$$\phi_{t=0} \leftarrow \mathbf{M}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T (\widehat{\phi}_t^n) dV$$

repeat

repeat

$$\widehat{\phi}_t^{k+1} \leftarrow (\mathbf{A}^k + \mathbf{A}_{GLS}^k)^{-1} (\mathbf{B}^k + \mathbf{B}_{GLS}^k)$$

until $\left| \|\nabla \widehat{\phi}_t^{k+1}\| - \|\nabla \widehat{\phi}_t^k\| \right| > \varepsilon$

$$\phi_{t+\Delta t} \leftarrow \mathbf{M}^{-1} \int_{\Omega} \mathbf{N}^T (\widehat{\phi}_t^n - \Delta t V_n) dV$$

until $t = T$

4.2.4 Algorithme global

L'algorithme 2 finalement obtenu montre deux principales étapes. La première, initialisation, produit un premier champ ϕ et puis le propage à vitesse nulle ce qui permet de commencer la propagation réelle avec un champ déjà projeté une fois -non cumulation des sources d'erreur à la première propagation. La seconde partie est constitué de l'association de propagation et de re-initialisation à la distance signée. L'initialisation à la distance signée est réalisée à chaque étape *a priori*, quelque soit la valeur du critère d'erreur sur la norme du gradient.

4.2.5 Illustration

Etude quantitative : propagation d'un iso-contour linéaire

L'étude d'erreur est réalisée sur un iso-contour représentatif d'une ligne droite. Un tel cas test permet de se libérer de l'erreur de discrétisation, la solution exacte de cet exemple appartenant à la base de projection de l'espace discrétisé avec des éléments quadrangulaire du premier ordre.

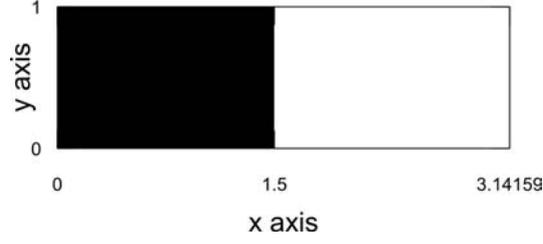


FIG. 4.5 – Caractéristiques initiales pour l'étude d'erreur.

Ainsi, seule apparaît l'erreur apportée par le schéma lui-même. L'étude d'erreur est réalisée sur un maillage de longueur non rationnelle, π , pour éviter les solutions triviales à l'initialisation. Les caractéristiques de ce cas test pour l'initialisation sont présentées sur la figure 4.5. L'aire rectangulaire est maillée avec des éléments quadrangulaire à 4 noeuds. Le nombre total d'éléments est égal au nombre d'éléments dans la longueur.

L'estimation d'erreur est réalisée au travers de deux critères traduisant la qualité de la solution obtenue. Le premier, e_ϕ , mesure l'erreur réalisée sur la position du front, le deuxième, e_∇ , mesure l'erreur absolue sur la norme du gradient. Pour un maillage de longueur L , ils sont définis par :

$$e_\phi = \frac{|x - \tilde{x}|}{L} \quad (4.32)$$

$$e_\nabla = \frac{\int_{\bigcup_{i=0}^n \Omega^{\phi+i}} \left| \|\nabla\phi^*\| - 1 \right| dV}{\int_{\bigcup_{i=0}^n \Omega^{\phi+i}} dV} \quad (4.33)$$

où x et \tilde{x} représentent respectivement l'abscisse exacte et obtenue numériquement du front.

Les paramètres influençant la position du front lors de l'initialisation sont le nombre de point de Gauss par éléments -car ils réalisent un filtre spatial de l'image- et la finesse du maillage. Le graphique 4.6 montre l'influence de ces facteurs. De plus, un nombre minimal de 64 points de Gauss est nécessaire pour obtenir la convergence. Avec ce nombre minimal de points de Gauss, l'erreur inhérente à l'initialisation décroît lorsque la finesse du maillage augmente.

Le graphique 4.7 présente l'évolution de l'erreur mesurée avec le critère e_∇ lors de l'initialisation à la distance signée. Alors que le calcul est réalisé sur le maillage entier, l'évolution de l'erreur en fonction des itérations est présentée sur le domaine contenant l'iso-0 et sur le domaine $\Omega^{\phi+1}$. La convergence des résultats se produit ainsi aussi bien sur le domaine contenant le front que sur le domaine adjacent.

Un cas test identique sert à l'étude d'erreur lors de l'étape de propagation. Sur ce maillage, le front se propage à vitesse unitaire. Les paramètres d'étude sont la finesse du maillage et le pas de temps.

La figure 4.8 montre que l'erreur est conservée quelque soit la taille d'élément. Concernant l'étude du pas de temps, nous avons défini un pseudo pas de temps lié à une condition de type Courant, Δt_{cfl} , correspondant à :

$$\Delta t_{cfl} = \min_{\underline{M} \in \Omega} \frac{h_e}{V_n} \quad (4.34)$$

où h_e est la taille d'élément contenant le point \underline{M} .

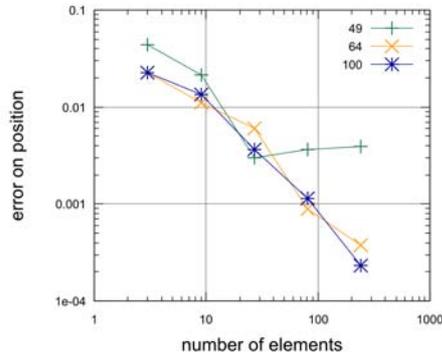
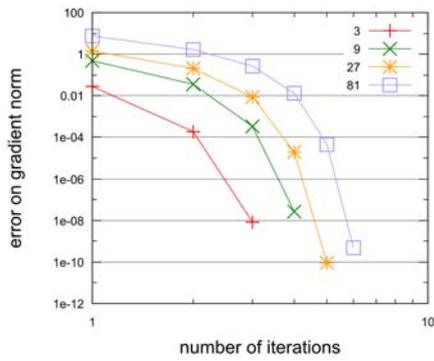
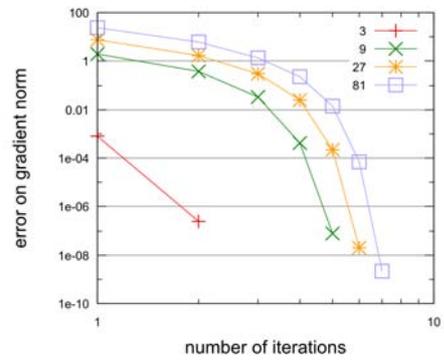


FIG. 4.6 – Erreur à l’initialisation mesurée avec le critère e_ϕ pour différentes densité de point de Gauss par élément.

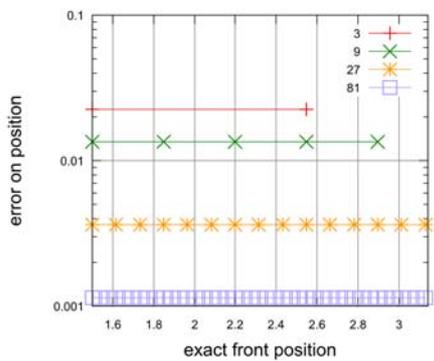


(a) Domaine Ω^ϕ .

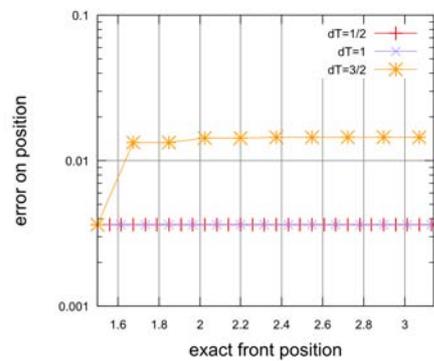


(b) Domaine $\Omega^{\phi+1}$.

FIG. 4.7 – Erreur à la distance signée mesurée avec le critère e_∇ en fonction du nombre d’itérations et en faisant varier le nombre d’éléments.



(a) Maillage de finesse variable, temps de propagation constant.



(b) Pas de temps variable, finesse du maillage constante, 27 éléments.

FIG. 4.8 – Erreur lors des étapes de propagation mesurée avec le critère e_ϕ .

Concrètement, ce pas de temps correspond à une distance maximum d'un élément parcouru au cours de la propagation. La figure 4.8(b) montre une augmentation de l'erreur à la première propagation pour un pas de temps supérieur au temps cfl.

Étude qualitative : interaction de contours circulaires

Pour compléter l'étude quantitative par un cas moins trivial, nous avons réalisé une étude qualitative sur la propagation à vitesse constante et l'interaction de deux contours circulaires. L'initialisation des iso-0 est réalisée à partir de l'image 4.9. Après initialisation, les deux contours se propagent à vitesse constante. L'étude est alors menée pour des variations de l'ordre des fonctions de forme et de la taille d'élément.

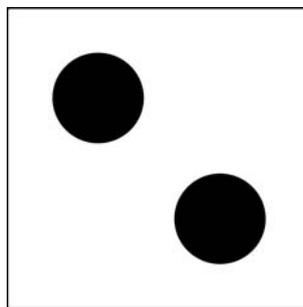


FIG. 4.9 – Image d'initialisation pour l'étude qualitative.

Pour des fonctions de forme du premier ordre, l'espace de projection permettant la représentation de fonctions distance signée est assez pauvre. Il ne permet en effet de représenter exactement que des segments droits. Comme le montre la figure 4.10, le traitement de contours curvilignes donne des résultats plutôt mauvais en terme d'initialisation. Malgré tout, la qualité des résultats s'améliore avec l'augmentation du nombre d'éléments. Finalement, pour utiliser des fonctions de forme du premier ordre, il faut des maillages très fins pour obtenir des résultats de bonne qualité.

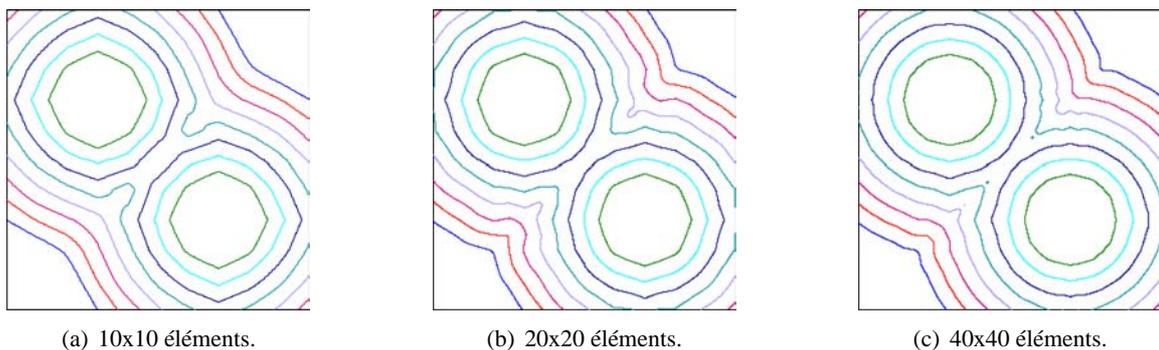


FIG. 4.10 – Interaction de contours circulaires à vitesse constante pour des fonctions de forme du premier ordre.

Avec des fonctions de forme d'ordre 2, figure 4.11, la discrétisation est nettement améliorée. En particulier, un niveau de précision quasiment semblable est atteint entre le maillage au premier

ordre de taille 40x40 et le maillage au deuxième ordre de taille 10x10. Lorsque la taille d'élément diminue, les angles fermés résultant de la coalescence des deux cercles sont de mieux en mieux représentés. Finalement, lorsque c'est possible, il vaut mieux privilégier l'utilisation de fonctions de forme d'ordre supérieur.

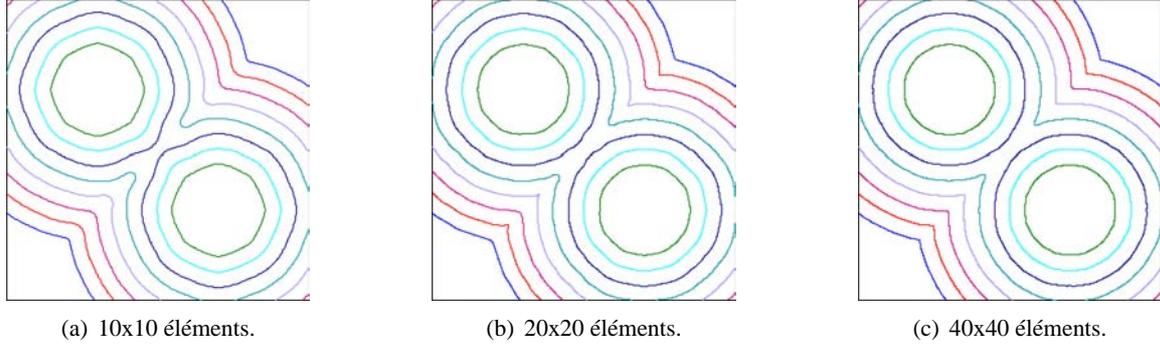


FIG. 4.11 – Interaction de contours circulaires à vitesse constante pour des fonctions de forme du deuxième ordre.

4.3 Problème mécanique à l'interface

Enrichissements

La discontinuité subie par le champ de déplacement lors d'un changement de phase est une discontinuité faible. Dans le cadre X-FEM, il convient donc d'enrichir la base des fonctions de forme par une fonction saut faiblement discontinue à l'interface de changement de phase. La fonction level set permet, *via* sa norme d'exhiber directement la fonction faiblement discontinue adéquate pour l'enrichissement :

$$\forall \underline{x} \in \Omega^\phi, \underline{\bar{u}} = \mathbf{N}\mathbf{u} + \mathbf{N}|\hat{\phi}|\hat{\mathbf{u}} \quad (4.35)$$

Cependant un problème rémanent de la technique X-FEM est la pollution de la solution non enrichie sur les éléments adjacents de la zone enrichie. En effet, dans la méthode X-FEM, ce sont les noeuds d'élément qui sont enrichis. L'influence des degrés de liberté enrichis se reporte ainsi sur les éléments adjacents à la zone enrichie. Pour fixer les idées, soit un élément \mathcal{E} adjacent à la zone enrichie, c'est à dire $\mathcal{E} \subset \Omega^{\phi+1}$. Soit alors \mathcal{S} l'ensemble des degrés de liberté de \mathcal{E} , et $\mathcal{S}_e \subset \mathcal{S}$ l'ensemble des noeuds enrichis. La discrétisation d'un champ quelconque ζ sur \mathcal{E} s'écrit alors, pour un enrichissement scalaire \hat{N} :

$$\zeta = \sum_{i \in \mathcal{S}_{S_e}} N_i \zeta_i + \sum_{k \in \mathcal{S}_e} N_k \hat{N} \hat{\zeta}_k \quad (4.36)$$

Considérons par ailleurs que les degrés de liberté enrichis $\hat{\zeta}_k$ sont déterminés uniquement par leur influence sur les éléments contenant la discontinuité physique. Alors, pour l'élément \mathcal{E} , les degrés de liberté classiques doivent permettre d'approcher au mieux la solution du problème variationnel, et ce faisant de supprimer l'influence des noeuds enrichis.

Or les degrés de liberté enrichis sont en facteur à la fois des fonctions de forme classiques et de

la fonction d'enrichissement. Pour minimiser leur influence, il faut donc :

$$\forall \hat{\zeta}, \exists \bar{\zeta}, \sum_{i \in \mathcal{S} - \mathcal{S}_e} N_i \bar{\zeta}_i + \sum_{k \in \mathcal{S}_e} N_k \hat{\zeta}_k = 0 \quad (4.37)$$

Le respect de cette relation se fait en requérant que le produit $\mathbf{N}\hat{\zeta}$ soit un vecteur de polynômes du même ordre, terme à terme, que le vecteur \mathbf{N} . La seule solution admissible est de construire un enrichissement respectant la propriété :

$$\forall \underline{x} \in \Omega^{\phi+1}, \underline{\nabla} \hat{N}|_{\underline{x}} = \underline{0} \quad (4.38)$$

où, par extension des notations précédentes le domaine $\Omega^{\phi+1}$ est l'ensemble des éléments adjacents aux éléments contenant la discontinuité physique, Ω^ϕ .

Si la fonction d'enrichissement respecte cette propriété, alors $\mathbf{N}\hat{\zeta}$ sera du même ordre que \mathbf{N} , ce qui permettra aux degrés de liberté classique de compenser la contribution induite par les degrés de liberté enrichis.

Il est *a priori* impossible de modifier le champ d'enrichissement uniquement sur les éléments adjacents et d'obtenir sur ce domaine un gradient nul. En effet, sur la frontière du domaine enrichi, sauf cas particulier, le champ $\hat{N}|_{\underline{x}}$ vérifie :

$$\forall \underline{x} \in \partial\Omega^\phi, \underline{\nabla} \hat{N}|_{\underline{x}t} \neq \underline{0} \quad (4.39)$$

\underline{t} est le vecteur tangent à $\partial\Omega^\phi$.

Par continuité tangentielle, il est impossible d'obtenir un champ à gradient nul en ne travaillant que sur les éléments adjacents. Mais il est difficile de travailler sur la fonction d'enrichissement dans le domaine Ω^ϕ sans modifier la position de ϕ^0 . Nous avons donc choisi de ne modifier l'enrichissement que sur le domaine $\Omega^{\phi+1} - \partial\Omega^\phi$ tout en étant conscient que cette solution entraîne la dégradation de la condition 4.38 sous la forme :

$$\forall \underline{x} \in \Omega^{\phi+1}, \|\underline{\nabla} \hat{N}|_{\underline{x}}\| \ll 1 \quad (4.40)$$

Pour construire un champ d'enrichissement à gradient nul sur les éléments adjacents, il est possible de s'appuyer sur une stratégie modifiant la valeur aux noeuds du champ d'enrichissement [SUK 01]. Cette méthode consiste à modifier la valeur de la fonction d'enrichissement sur les éléments adjacents en fonction de la valeur moyenne aux autres noeuds. Cette approche induit un calcul dans un schéma difficile à étendre à un code élément finis. Par ailleurs, un point de vue de modification analytique intéressant est proposé dans [MOË 03], consistant à retirer de la fonction d'enrichissement les composantes liées aux fonctions de formes classiques.

Soit $\hat{\phi}$ la fonction d'enrichissement construite sur ϕ défini à la section 4.2.3, il s'agit de régulariser la fonction d'enrichissement sur $\Omega^{\phi+1}$, pour obtenir une fonction $\tilde{\phi}$ adéquate au sens de 4.40, et définie par :

$$\tilde{\phi} = \hat{\phi} - \Upsilon \quad (4.41)$$

la fonction Υ est la fonction de régularisation à déterminer.

Le problème de minimisation associé à cette définition prend alors la forme :

$$\forall \underline{x} \in \Omega^{\phi+1}, \min_{\Upsilon: \Omega^{\phi+1} \rightarrow \mathbb{R}} (\underline{\nabla} \hat{\phi} - \underline{\nabla} \Upsilon) \quad (4.42)$$

$$\forall \underline{x} \in \partial\Omega^\phi \cup \partial\Omega^{\phi+1}, \Upsilon = 0 \quad (4.43)$$

De ce problème, se déduit immédiatement la formulation élément finis :

$$\nabla \mathbf{N}^T \nabla \mathbf{N} \mathbf{Y} = \underline{\nabla \mathbf{N}} \underline{\nabla} \hat{\phi} \quad (4.44)$$

A la résolution de ce problème, il faut ajouter la condition aux limite 4.43 sur les noeuds appartenant à $\partial\Omega^{\phi+1} \cup \partial\Omega^{\phi}$. Cette condition est imposée par la méthode de condensation des degrés de liberté à valeur imposée.

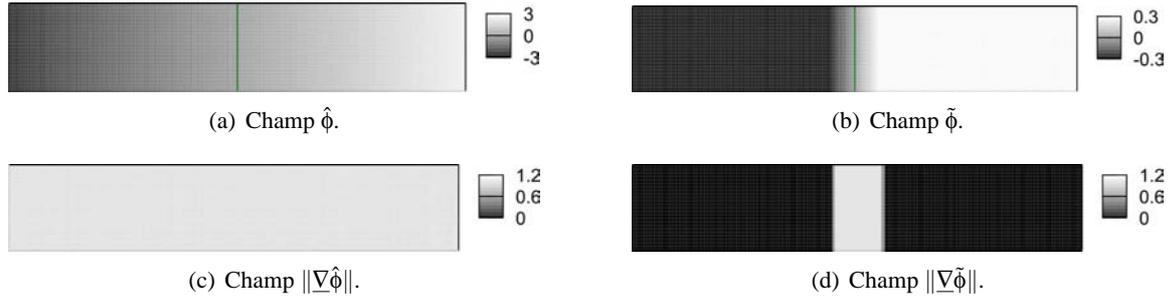


FIG. 4.12 – Enrichissement $\tilde{\phi}$ pour un contour linéaire et un maillage quadrangle régulier de 9×9 éléments d'ordre 2.

Pour illustrer l'obtention de ce champ d'enrichissement, nous traitons un cas où la solution exacte du problème appartient à l'espace de projection, c'est à dire avec une iso-0 linéaire, et un cas où la solution exacte, ou toute au moins voulue, ne peut être atteinte, avec une iso-0 circulaire. Pour des raisons de représentation, le calcul est effectué ici sur tout le domaine de définition du champ level set.

Dans le cas de l'iso-0 linéaire, le champ d'enrichissement obtenu est effectivement de gradient nul sur les éléments adjacents à la zone d'enrichissement (*cf.* fig. 4.12). Par contre, pour une iso-contour circulaire, seule la diminution de la norme du gradient sur la bande d'élément directement adjacente est possible. Cette solution permet néanmoins de minimiser la pollution sur $\Omega^{\phi+1}$. La fonction d'enrichissement est utilisée à la fois pour la résolution et du problème mécanique et du problème d'initialisation à la distance signée level set. En outre, l'emplacement de l'iso-0 n'est pas modifié par la détermination du champ d'enrichissement.

4.4 Exemple de propagation : changement de phase diffusif dans le 16MND5

4.4.1 Caractéristiques de la simulation

Grâce au travail effectué précédemment, il est désormais possible de réaliser la simulation de l'état mécanique d'un milieu soumis à un changement de phase diffusif. Nous avons appliqué les techniques présentées sur le matériau 16MND5 utilisé pour certaines cuves de réacteur nucléaire. Le champ matériel est initialisé par deux inclusions de phase austénitique dans une matrice martensitique. Le chargement est uniquement un chargement en température, correspondant au changement de phase austénitique présenté figure 4.15. La température est donc imposée uniforme sur le maillage et subit une variation totale régulière en fonction du temps de 70°C (de 740°C à 810°C). Les conditions aux limites sont explicitées figure 4.14.

4. Discrétisation du problème de changement de phase

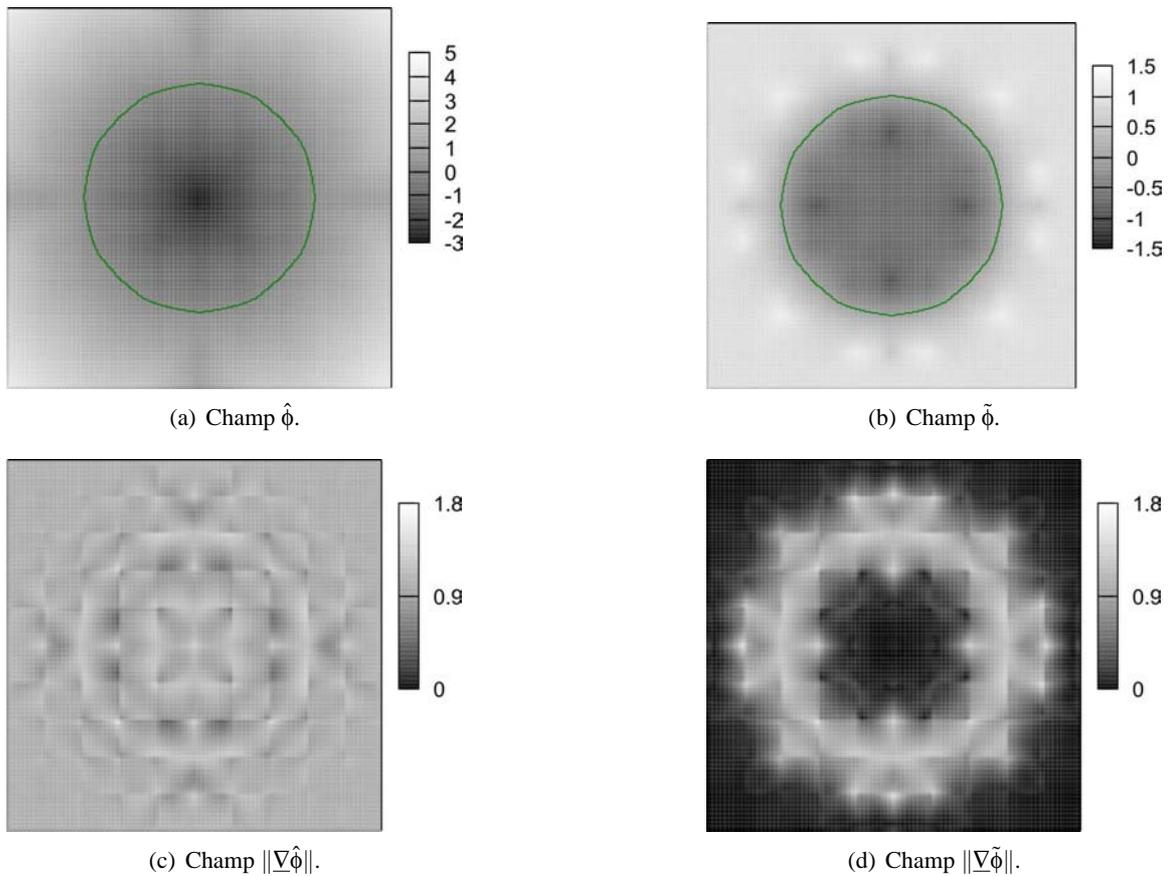


FIG. 4.13 – Enrichissement $\tilde{\phi}$ pour un contour circulaire et un maillage quadrangle régulier de 10×10 éléments d'ordre 2.

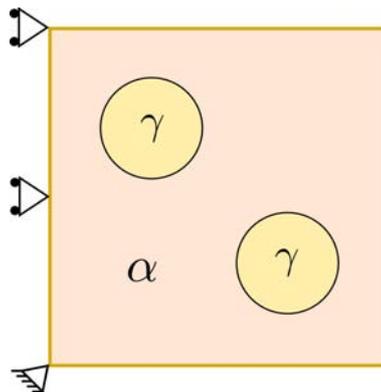


FIG. 4.14 – Géométrie et conditions aux limites pour le cas simulé.

Les données matériaux sont issues des travaux de [GRO 00, VIN 02, AHR 04]. Elles sont considérées constantes pendant le chargement thermique et égales aux propriétés de référence avant transformation, donnée dans le tableau 4.1.



FIG. 4.15 – Variation typique de la température lors du changement de phase austénitique du 16MND5.

	phase α	phase γ
module d'Young	$E_{\alpha} = 135.GPa$	$E_{\gamma} = 135.GPa$
coefficient de Poisson	$\nu_{\alpha} = .3$	$\nu_{\gamma} = .3$
limite élastique	$\sigma_{\alpha}^y = 350.MPa$	$\sigma_{\gamma}^y = 40.MPa$
module d'érouissage isotrope	$H_{\alpha} = 3700.MPa$	$H_{\gamma} = 3000.MPa$

TAB. 4.1 – Propriétés des phases martensitiques et austénitiques du 16MND5 à 720°C.

La géométrie initiale avec les inclusions de phase γ est libre de contrainte. Le calcul a été réalisé sur un maillage de 20x20 éléments quadrangulaires. La vitesse du front est prise constante telle que le changement de la phase α à la phase α se fasse pendant la durée du chargement en température.

4.4.2 Evolution de la contrainte et du déplacement

Les figures 4.17 et 4.16 présentent l'évolution de la norme du champ de déplacement et de la contrainte de von Mises pendant le chargement en température. Pour le champ de déplacement on retrouve la contraction due à la différence de compacité entre les deux phases. Le champ de contrainte de von Mises montre les effets sur la contrainte induits par la plastification et la propagation du front.

4.5 Conclusions-perspectives

Le calcul mécanique d'un changement de phase est un problème où apparaissent des frontières mobiles et des champs de déplacement faiblement discontinus. Nous avons choisi traiter ces problèmes par l'utilisation en parallèle de la méthode level set et de la méthode X-FEM.

Concernant le cycle de vie de la fonction level set modélisant le support du front, nous proposons une résolution numérique dans le cadre éléments finis, depuis l'initialisation jusqu'à la propagation.

Ensuite, nous avons couplé le calcul de déplacement dans le cadre éléments finis étendus X-FEM, avec des enrichissements adéquats issus du calcul level set. Le comportement du matériau est celui présenté dans le chapitre précédent.

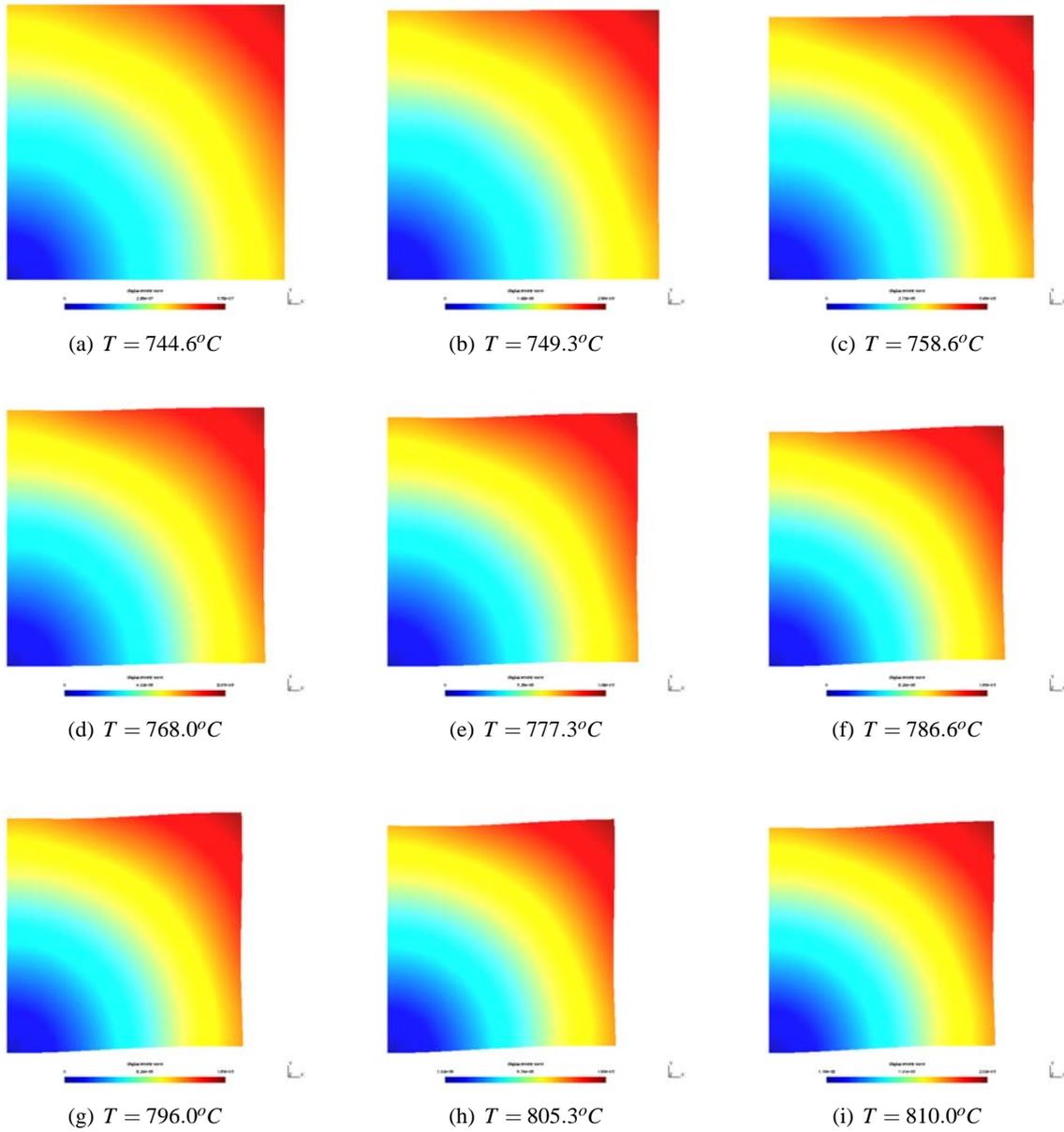


FIG. 4.16 – Evolution de la norme du champ de déplacement sur le maillage déformé.

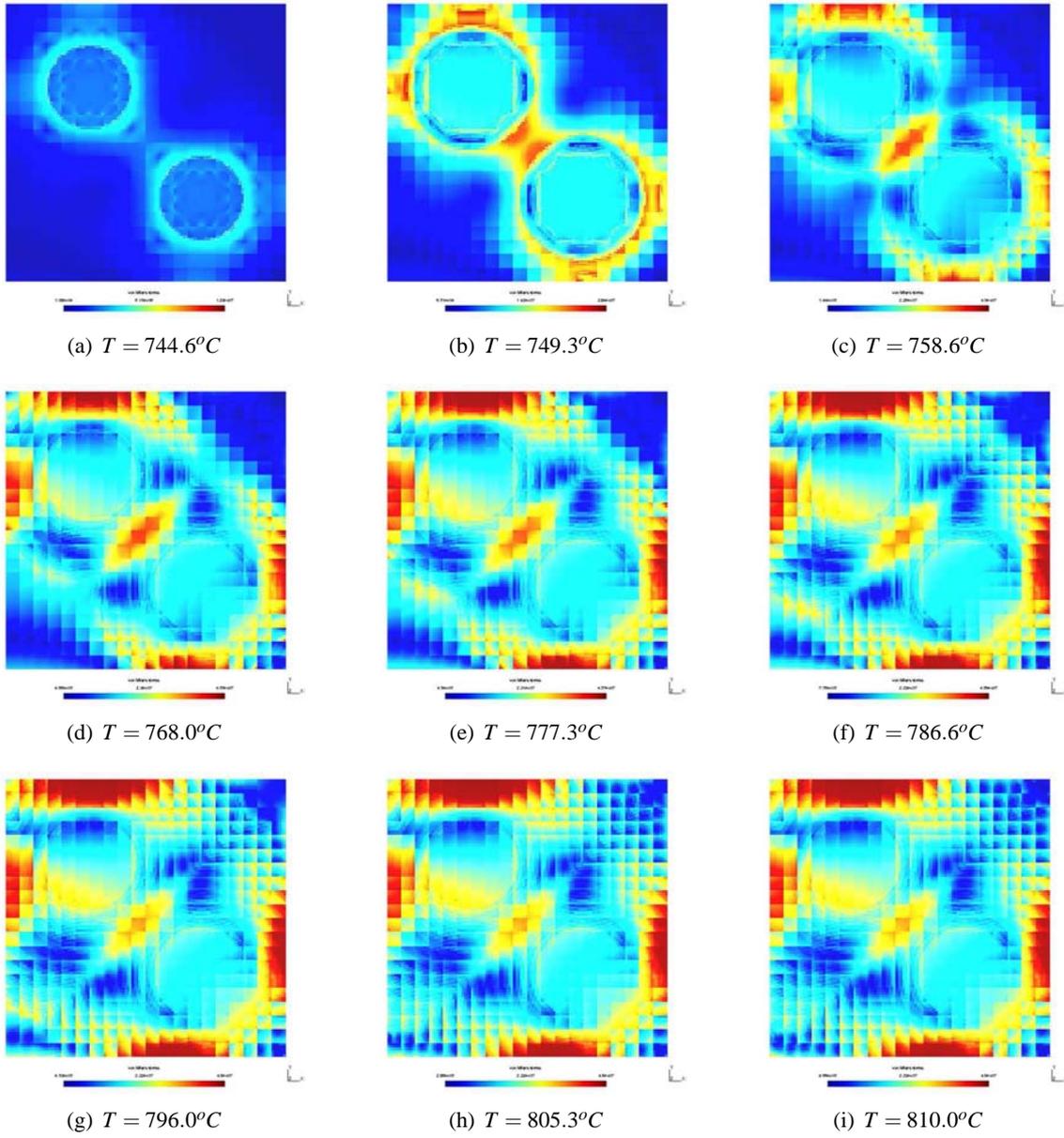


FIG. 4.17 – Evolution de la contrainte de von Mises.

4. Discrétisation du problème de changement de phase

Enfin, nous avons présenté un exemple de simulation, représentatif d'une transformation diffusive dans le 16MND5. Cet exemple a été réalisé avec une vitesse de propagation constante.

Les résultats obtenus sont encore trop récents pour mener à une interprétation physique poussée. Toutefois, ce cas test montre l'efficacité et la viabilité numérique des solutions retenues. Pour ce qui est de la vitesse de propagation du front, le prochain chapitre présente un début d'investigation sur leur calcul dans le cadre X-FEM.

Chapitre 5

Force motrice sur le front

Le calcul mécanique élément fini étendu en association avec la méthode level set présentée permet le calcul de l'état mécanique, ainsi que des interactions entre différents fronts. Cependant l'avancée du front n'est reliée à aucune physique locale. Ce chapitre présente une démarche pour donner un sens physique à la propagation du front par l'utilisation du concept de force motrice présenté au chapitre 1.

Sommaire

5.1	Intégrale indépendante du contour	72
5.2	Repérage sur le front	73
5.2.1	Champ orthogonal	73
5.2.2	Contour fermé	74
5.2.3	Exemples pour des contours simples	74
5.3	Application numérique de l'intégrale indépendante du contour	75
5.3.1	Discretisation du front	75
5.3.2	Champ d'extension virtuel	76
5.3.3	Résolution numérique	77
5.4	Exemple de calcul de force motrice par intégrale indépendante	77
5.4.1	Choix de la discrétisation du front	77
5.4.2	Choix du paramétrage du champ d'extension	78
5.4.3	Evolution de la force motrice lors du chargement pour l'essai Satoh	80
5.5	Conclusions-perspectives	81

5.1 Intégrale indépendante du contour

L'avancée du front de transformation peut être reliée au saut des quantités mécaniques sur le front. Cependant, pour obtenir cette vitesse, sans autre développement théorique, il faut posséder une modélisation discrète du front. D'autre part, d'un point de vue général pour une simulation numérique, le saut des quantités définies uniquement aux points de Gauss est mal défini sur le front.

L'utilisation d'intégrale indépendante du contour permet de transporter le problème défini sur le front en un problème défini sur un domaine contenant une partie du front et ainsi de s'affranchir des problèmes évoqués précédemment.

Pour construire l'intégrale indépendante du contour, considérons en premier lieu le domaine représenté figure 5.1.

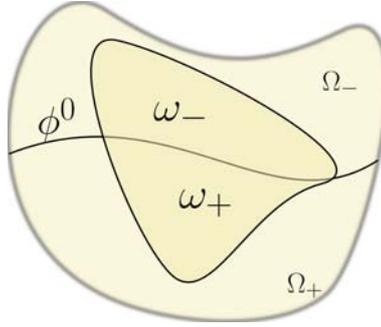


FIG. 5.1 – Domaine d'intégration utilisé pour la détermination d'une intégrale indépendante du contour pour les forces motrices. Par ailleurs, $\Omega = \Omega_+ \cup \Omega_-$, $\partial\Omega = \partial\Omega_+ \cup \partial\Omega_-$.

L'interface ϕ^0 représente un front de discontinuité faible sur le champ de déplacement. D'autre part, soit le tenseur d'Eshelby \underline{b} et l'équation d'équilibre matériel $\text{div}(\underline{b}) = \underline{0}$. Enfin, soit un champ vectoriel d'extension virtuel \underline{q} défini sur Ω . Ces éléments autorisent l'écriture successive de :

$$\begin{aligned}
 \forall \underline{M} \in \Omega, \forall \underline{q} \in \mathbb{E}_{ad} &= \{ \underline{f} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3 \mid \underline{f} = \underline{0} \text{ sur } \partial\Omega \} \quad , \\
 \text{div}(\underline{b}) &= \underline{0} \iff \\
 \underline{q} \cdot \text{div}(\underline{b}) &= 0 \iff \\
 \int_{\Omega} \text{div}(\underline{q} \cdot \underline{b}) - \underline{\nabla} \underline{q} : \underline{b} \, dV &= 0 \iff \\
 \int_{\partial\Omega_+ \cup \phi^0} \underline{q} \cdot \underline{b} \cdot \underline{n}_+ \, dS + \int_{\partial\Omega_- \cup \phi^0} \underline{q} \cdot \underline{b} \cdot \underline{n}_- \, dS - \int_{\Omega} \underline{\nabla} \underline{q} : \underline{b} \, dV &= 0 \quad (5.1)
 \end{aligned}$$

où \underline{n}_+ et \underline{n}_- désignent les normales sortantes de, respectivement, $\partial\Omega_+$ et Ω_- .

Indifféremment pour $\partial\Omega_+$ ou $\partial\Omega_-$, les termes intégraux sur les frontières s'écrivent :

$$\int_{\partial\Omega_{\bullet} \cup \phi^0} \underline{q} \cdot \underline{b} \cdot \underline{n}_{\bullet} \, dS = \int_{\phi^0} \underline{q} \cdot \underline{b} \cdot \underline{n}_{\bullet} \, dS + \int_{\partial\Omega_{\bullet}} W \underline{q} \cdot \underline{n}_{\bullet} + \underline{q} \cdot \underline{\sigma} : \underline{F} \cdot \underline{n}_{\bullet} \, dS \quad (5.2)$$

avec \underline{F} le gradient du champs de déplacement.

Le report dans l'identité 5.2 des caractéristiques au frontière de l'espace \mathbb{E}_{ad} donne :

$$\int_{\Omega_{\bullet} \cup \phi^0} \underline{q} \cdot \underline{b} \cdot \underline{n}_{\bullet} \, dS = \int_{\phi^0} \underline{q} \cdot \underline{b} \cdot \underline{n}_{\bullet} \, dS \quad (5.3)$$

Les normales n_+ et n_- sur le front ϕ_0 étant égales en normes et opposées, l'utilisation de la fonction saut donne, dans 5.1 :

$$\int_{\phi^0} \llbracket \underline{q} \cdot \underline{b} \cdot \underline{n}_+ \rrbracket \, dS - \int_{\Omega} \underline{\nabla} \underline{q} : \underline{b} \, dV = 0 \quad (5.4)$$

Par définition, comme nous l'avons montré en 1.3.3, la force motrice sur le front s'écrit :

$$\underline{f}^\Sigma = -\llbracket \underline{b} \rrbracket \cdot \underline{n} \quad (5.5)$$

De plus, le champ vectoriel \underline{q} est choisi tel que :

$$\forall \underline{x} \in \phi^0, \underline{q} = \underline{q} \underline{n}_+ \quad (5.6)$$

Enfin, soit ω un sous domaine quelconque de Ω contenant tout ou une partie de ϕ^0 , et la condition supplémentaire sur le champ d'extension virtuel :

$$\forall \underline{x} \in \Omega - \omega, \underline{q} = \underline{0}$$

L'intégrale 5.4 devient ainsi indépendante du contour :

$$\int_{\phi^0 \cap \omega} \underline{q} \cdot \underline{f}^\Sigma \, dS + \int_{\omega} \underline{\nabla} \underline{q} : \underline{b} \, dV = 0 \quad (5.7)$$

Par le biais de cette intégrale indépendante du contour, la force motrice peut être déterminée sans passer par un calcul explicite le long du front. L'avantage est évidemment d'avoir un lien avec le calcul mécanique effectué lui sur une interpolation de Ω .

5.2 Repérage sur le front

5.2.1 Champ orthogonal

Le problème globale à résoudre, au moins pour les changements de phase diffusifs, est la construction de simulations où la propagation du front sera piloté par la force motrice \underline{f}^Σ . Pour pouvoir utiliser cette force, nous avons présenté au chapitre 1, cf. 5.1, une intégrale indépendante du contour permettant d'obtenir une valeur de cette force motrice. Or cette intégrale indépendante du contour fait apparaître un terme intégré sur le front. Son utilisation passe donc nécessairement par la définition d'un repérage intrinsèque au front, autrement dit un système de coordonnées curviligne pour ϕ^0 .

En premier lieu, le champ level set donnant l'iso-0 permet d'obtenir en tout point, *via* son gradient, la normale au front. Mais cette information n'est que locale. La construction d'un système de repérage curviligne, passe par la définition du champ orthogonal à ϕ^0 . La définition du champ orthogonal ψ au champ level set, est réalisée à partir du champ à norme initialisée, $\hat{\phi}$, *via* la résolution du problème de minimisation :

$$\forall \underline{x} \in \Omega^{\phi^0+1}, \min_{\psi: \Omega \rightarrow \mathbb{R}} \|\underline{\nabla} \psi - \underline{\nabla} \hat{\phi} \wedge \underline{e}_{n+1}\| \quad (5.8)$$

$$\exists \underline{x}_0 \in \Omega, \psi = 0. \quad (5.9)$$

si Ω est une partie de \mathbb{R}^2 , alors, \underline{e}_{n+1} représente le 3^{ème} vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^3 ; \underline{x}_0 est un point quelconque de Ω permettant de fixer une origine au repère curviligne.

La difficulté inhérente à la réalisation d'un repérage curviligne advient lorsque le front est un contour fermé. En effet, dans ce cas, le repérage n'est défini que modulo la longueur du front. La formulation présentée ci-avant n'est donc pas apte, sur un espace de projection continu, à représenter une telle situation.

5.2.2 Contour fermé

Lors de la création d'un repérage sur un contour fermé, il est aisé de comprendre que, pour un endroit indéterminé, le champ devra effectuer un saut pour revenir à sa valeur initiale le long du contour. Le champ orthogonal que nous souhaitons déterminer ici est constant suivant les normales à l'iso-0 comme cela est montré dans Sethian. Pour créer un repérage curviligne d'un contour fermé, il suffit donc d'ajouter la possibilité de saut suivant une normale à l'iso-0. Deux possibilités maintenant habituelles s'offrent à nous, soit une partition du maillage suivant des frontières d'éléments les plus proches d'une normale choisie au hasard, soit l'enrichissement de l'espace de projection par une fonction saut sur une bande d'élément suivant une normale au front.

nous avons retenu la deuxième solution. Pour cela, il faut un point quelconque P_S dans l'ensemble des éléments nécessitant un repérage orthogonal. En ce point, la normale à l'iso-0 est donnée par le gradient de la fonction level set. A ce moment, nous avons toutes les données nécessaires pour construire l'enrichissement saut.

Cependant, il ne doit y avoir qu'un seul enrichissement saut sur tout le contour fermé. La stratégie la plus simple, et qui s'accordera par la suite aux restrictions nécessaires pour le calcul des forces motrices, est d'assurer que le domaine de calcul du champ orthogonal, $\bigcup_{i=1}^n \Omega^{\phi+i}$, n'est pas simplement connexe -c'est un domaine troué. Sous cette condition, l'ensemble des éléments adjacents peut se déduire comme étant le domaine connexe contenant le point P_S , dont les éléments sont tranchés par la droite représentative de la discontinuité, le point P_S étant tel que le support de la fonction saut intersecte le domaine en plus de deux endroits.

La connaissance d'une paramétrisation de la droite dans le repère global du maillage permet de construire simplement l'enrichissement de type heaviside nécessaire au saut des coordonnées curvilignes. En effet, soit, $\mathcal{D}(\underline{M}) = 0$ l'équation implicite de la droite sur laquelle s'appuie l'enrichissement. Alors la fonction d'enrichissement $H_{\mathcal{D}}$ s'écrit :

$$\forall \underline{M} \in \Omega, H_{\mathcal{D}}(\underline{M}) = \begin{cases} -1 & \mathcal{D}(\underline{M}) < 0. \\ 1 & \mathcal{D}(\underline{M}) \leq 0. \end{cases} \quad (5.10)$$

Sur l'espace de projection ainsi créé, le problème posé initialement peut être résolu sans se préoccuper de la fermeture éventuelle du contour :

$$\underline{\nabla} \mathbf{N}^T \underline{\nabla} \mathbf{N} \tilde{\psi} = \underline{\nabla} \mathbf{N} \underline{\nabla} \hat{\phi} \wedge \underline{e}_{n+1} \quad (5.11)$$

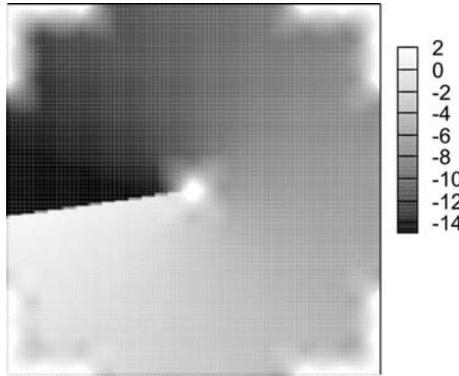
La condition aux limites est appliquée en imposant une valeur nulle sur un noeud du maillage choisit au hasard. Techniquement, une méthode de condensation permet l'application de la condition.

5.2.3 Exemples pour des contours simples

Les figures 5.2 et 5.3 montrent les résultats d'orthogonalisation pour les contours linéaires et circulaires. L'enrichissement saut est activé dans les deux cas. Dans le cas du contour ouvert, l'utilisation d'un enrichissement saut perturbe la solution souhaitée, il convient donc de le supprimer.


 FIG. 5.2 – Champ orthogonal ψ pour un support linéaire (fig. 4.12(a)).

Dans le cas du contour fermé, la présence de l'enrichissement saut permet d'obtenir effectivement un repérage curviligne du front représenté par l'iso-0. Pour cette figure, il convient de souligner que le calcul a été effectué sur un domaine non simplement connexe bien que les résultats soient donnés pour Ω .


 FIG. 5.3 – Champ orthogonal ψ pour un support circulaire (fig. 4.13(a)) avec enrichissement.

5.3 Application numérique de l'intégrale indépendante du contour

5.3.1 Discrétisation du front

L'obtention d'un repérage curviligne du front à partir du champ level set orthogonal présenté à la section précédente autorise la création d'une discrétisation du front suivant le repère curviligne défini par ψ . Dans un souci de simplicité, la discrétisation effectuée est régulière en fonction de l'abscisse curviligne. Pour construire cette discrétisation, le parcours du domaine Ω^ϕ permet de déterminer les abscisses curvilignes maximales et minimales, ψ_{max} et ψ_{min} . A partir de ces deux valeurs est créé un ensemble de noeud \mathcal{N}^f identifiés par leur abscisse ψ dans le système de coordonnées curviligne.

Une fois le front discrétisé en un ensemble de points, l'approximation de la force motrice sur le front par un choix de fonction de forme standard pour des éléments linéaires, *c.f.* figure 5.4, s'écrit :

$$\begin{aligned} f^\Sigma &= \sum_{i \in \mathcal{N}^f} N_i f_i^\Sigma \\ &= \mathbf{N} \mathbf{f}^\Sigma \end{aligned} \quad (5.12)$$

\mathbf{f}^Σ est le vecteur nodal de force motrice.

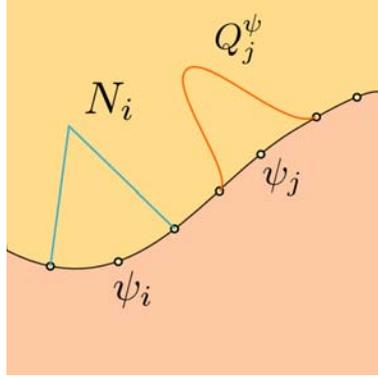


FIG. 5.4 – Discrétisation du front, définition des fonctions de forme et du champ d'extension virtuel.

5.3.2 Champ d'extension virtuel

Il faut par ailleurs déterminer le champ d'extension virtuel \underline{q} permettant la définition de l'intégrale indépendante du contour. Pour cela nous nous appuyons sur les travaux menés par Rajaram [RAJ 00] sur le calcul des facteurs d'intensité des contraintes pour des problèmes de mécanique de la rupture. Dans cet article, il est souligné l'importance du choix du champ d'extension virtuel pour obtenir un calcul précis des termes d'intégrale indépendante incluant un champ d'extension virtuel. Le champ \underline{q} que nous allons utiliser est défini par, dans la base (ϕ, ψ) :

$$\forall i \in \mathcal{N}^f, \underline{q}_i = Q_i^\psi(\psi) Q^\phi(\phi) \underline{n}_\phi \quad (5.13)$$

Les fonctions Q_i^ψ et Q^ϕ sont définies par :

$$\forall \psi \in \mathbb{R}, Q_i^\psi(\psi) = \begin{cases} e^{-\left(\frac{|\psi - \psi_i|}{|\psi - \psi_i| - n_0}\right)^2} & \text{si } |\psi - \psi_i| < n_0 \\ 0. & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.14)$$

$$\forall \phi \in \mathbb{R}, Q^\phi(\phi) = \begin{cases} e^{-\left(\frac{|\phi|}{|\phi| - r_0}\right)^2} & \text{si } |\phi| < r_0 \\ 0. & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.15)$$

où ψ_i est la coordonnée du $i^{\text{ème}}$ noeud du front.

Cette écriture prend deux paramètres, le premier, n_0 , caractérise la demi-largeur sur laquelle Q_i^ψ est non nul dans la direction du front. Il faut souligner que pour correspondre à la discrétisation du champ d'effort moteur, le champ d'extension virtuel est exprimé par des pseudo fonctions exprimées -donc dépendantes- au noeud du front discrétisé. Dans les calculs effectués, le recouvrement entre les fonctions de forme est nul, c'est à dire que le support de la fonction Q_i^ψ est le double de la longueur d'un élément du front, comme le montre la figure 5.4.

Le second, r_0 , dans la direction orthogonale au front donne un rayon d'influence du champ virtuel. Cette nécessité fait réapparaître ici la nécessité de déterminer une taille minimale de contour fermé à partir de laquelle il est autorisé de calculer d'une part le champ orthogonal et d'autre part la force motrice sur le front.

Pour un contour fermé, nous avons déterminé une taille minimale telle que $\bigcup_{i=0}^3 \Omega^{\phi+i}$ n'est pas simplement connexe. En suivant ce critère de taille minimale, un calcul correct des forces motrices

nodales est assuré en permanence, et le champ orthogonal au front est déterminé dans toutes les situations.

5.3.3 Résolution numérique

Le problème que nous nous proposons de résoudre est la résolution numérique de l'identité :

$$\int_{\phi^0} \underline{f}^\Sigma \underline{q} \, dS + \int_{\omega} \underline{\nabla q} : \underline{b} \, dV = \underline{0} \quad (5.16)$$

La discrétisation du front, en association avec la définition des points de Gauss associés, rend possible le calcul de la matrice résultante de l'intégration sur le front et définie par :

$$\forall (i, j) \in (\mathcal{N}^f)^2, \mathbf{A}_{ij} = \int_{\phi^0} N_j Q_i^\Psi Q^\phi(0) \, dS \quad (5.17)$$

D'autre part, le terme intégral exprimé sur le domaine A peut lui aussi être déterminé par l'utilisation des points de Gauss existants sur le maillage, conduisant à l'obtention d'un vecteur nodal exprimé sur les noeuds du front sous la forme :

$$\forall i \in \mathcal{N}^f, \mathbf{b}_i = \int_{\omega} \underline{\nabla q}_i : \underline{b} \, dV \quad (5.18)$$

Le vecteur des forces motrices nodales est alors donné par :

$$\mathbf{f}^\Sigma = (\mathbf{A})^{-1} \mathbf{b} \quad (5.19)$$

Enfin, il convient de souligner que, les champ virtuel n'étant pas défini sur le maillage du domaine pour les noeuds extrêmes du front, nous avons supprimé ces degrés de liberté dans le problème discrétisé. La valeur au noeuds extrêmes est donnée en post-traitement par recopie de la valeur au noeud voisin.

5.4 Exemple de calcul de force motrice par intégrale indépendante

5.4.1 Choix de la discrétisation du front

Pour estimer la qualité des résultats du calcul de saut effectué *via* le processus présenté ci-dessus, nous avons réalisé une étude sur un champ \underline{T} défini sur le domaine présenté figure 5.5 et défini par :

$$\forall \underline{M} \in \Omega = [0; 5] \times [0; 1], \underline{T} = \begin{cases} \underline{Id} & \text{si } \underline{M} \cdot \underline{e}_x > 2.5 \\ \underline{0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.20)$$

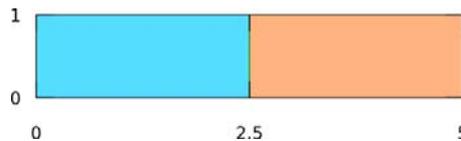


FIG. 5.5 – Domaine pour le calcul de saut par intégrale indépendante.

Le but de cet étude sur le calcul de saut est d'estimer l'influence de la discrétisation, en particulier du front, sur la qualité du résultat. Pour le calcul d'intégrale indépendante, il y a plusieurs choix à effectuer, en particulier le nombre de points de discrétisation du front et les paramètres r_0 et n_0 du champ d'extension virtuelle.

Pour ce dernier, le paramètre de recouvrement, il a une portée essentiellement pratique réalisant un lissage implicite des résultats. Nous l'avons fixé à la longueur d'un élément front, c'est à dire que deux champs d'extension virtuel successifs ne se recouvrent que sur un seul élément. Ainsi nous minimisons l'influence de ce lissage implicite sur les résultats.

Pour le cas test présent, seule la discrétisation du front, ainsi que le nombre d'éléments du maillage du domaine a alors une influence sur le résultat. Nous avons ainsi réalisé le calcul de saut pour trois finesses de maillage du domaine -15x10, 27x18 et 39x26 éléments- et trois finesses de discrétisation du front -10, 18 et 26 noeuds sur le front.

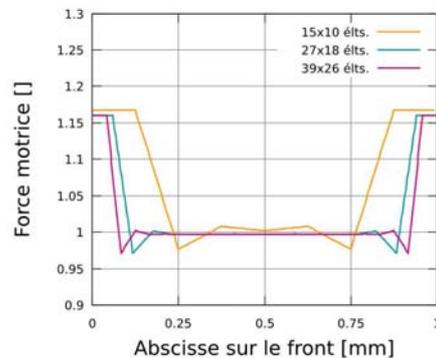


FIG. 5.6 – Calcul du saut : front discrétisé à finesse égale avec le maillage.

Concernant l'influence du maillage, la figure 5.6 montre que le calcul du saut est plutôt bon sur le centre du maillage mais est pollué sur les bords. Dans ces conditions, le calcul sur le maillage de 39x26 éléments donne le meilleur résultat puisqu'il implique aussi la meilleure discrétisation du front, minimisant par là l'erreur sur les bords.

Par contre, à maillage constant, un trop grand nombre de noeud sur le front peut engendrer des instabilités. C'est particulièrement visible sur la figure 5.7(a), pour le maillage 15x10 éléments et 26 noeuds sur le front. Le discrétisation trop fine du front entraîne des oscillations sur le calcul de la valeur du saut.

De cette étude, il est finalement possible de déduire que la meilleure discrétisation *a priori* du front est celle pour laquelle la taille d'élément du front est sensiblement égale à la longueur caractéristique des éléments contenant le front. Ce résultat est conforté en s'appuyant sur l'intégrale indépendante du contour, c'est en effet à travers elle que la discrétisation du front et du domaine sont mises en relation, il semble normal de ne pas introduire une trop grande différence entre taille d'élément du front et du maillage.

5.4.2 Choix du paramétrage du champ d'extension

Sur la géométrie précédente, avec le maillage 27x18 éléments, nous avons calculé un calcul thermo-mécanique représentatif d'un essai de type Satoh [SAT 72], explicité sur la figure 5.8. Il

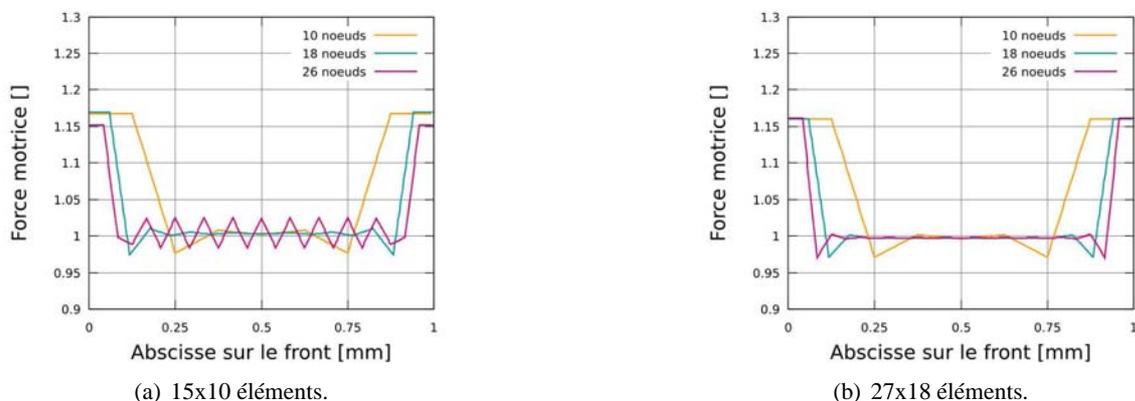


FIG. 5.7 – Calcul du saut : influence de la discrétisation du front.

s'agit d'une barre bloquée à ces deux extrémités et soumise à une variation de température. Cet essai présente l'intérêt de 'convertir' la dilatation en contrainte.

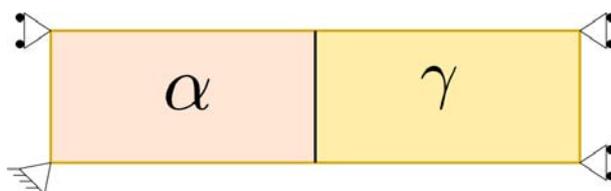
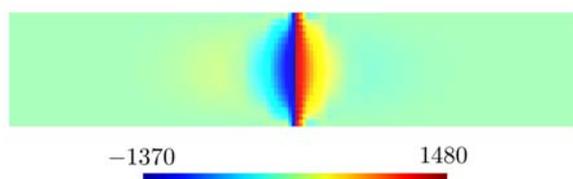


FIG. 5.8 – Essai Satoh pour le calcul de force motrice pour un chargement thermo-mécanique.

Dans un premier temps, cet essai va nous servir à définir les règles d'usage pour la détermination du paramètre r_0 du champ d'extension virtuel. En effet, contrairement au cas test précédent, il y a ici une variation du champ \underline{b} le long de la barre. Les matériaux pour les phases α et γ sont ceux du 16MND5 à 700°C. Par contre, le milieu modélisé est uniquement un bi-matériau, c'est à dire qu'il n'y a pas de différence de compacité entre les phases α et γ . Le chargement pour l'étude de r_0 correspond à une variation de température de 5°C. Avec cette variation de température il n'y a pas de plastification du matériau.

FIG. 5.9 – Composante b_{xx} du tenseur d'Eshelby.

La figure 5.9 montre la composante b_{xx} du tenseur d'Eshelby calculé en tout point. Sur cette figure apparaît effectivement le caractère fondamental des forces motrices : sur le front, il y a pré-

sence d'un saut de la composante b_{xx} de $\underline{\underline{b}}$, mais dès que l'on s'éloigne du front le champ b_{xx} est de nouveau constant.

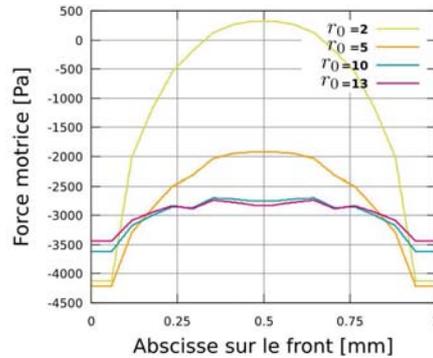


FIG. 5.10 – Composante normale du saut du tenseur d'Eshelby sur le front en fonction du paramètre r_0 exprimé en multiple de la taille d'élément.

Sur ce cas test nous avons réalisé le calcul de la force motrice pour des valeurs croissantes du paramètre r_0 . Ces résultats sont présentés figure 5.10. Le calcul de la force motrice est effectivement dépendant du paramètre r_0 . Il faut que ce paramètre soit suffisamment important pour stabiliser les résultats du calcul de force motrice, ici au moins un rayon de 10 éléments. Par ailleurs, comparativement à la figure 5.9, le résultat du calcul de force motrice, mis à part sur les bords, est satisfaisant lorsque ce rayon minimal est respecté.

5.4.3 Evolution de la force motrice lors du chargement pour l'essai Satoh

Les conditions d'obtention de la force motrice ayant été déterminées, il est possible désormais de s'intéresser à l'évolution de la force motrice pour des conditions réalistes. Nous avons ainsi repris le cas test précédent en faisant varier la température jusqu'à plastification du milieu dont la limite élastique est la plus faible -phase γ .

Sur les figures 5.12 et 5.13 sont représentés la composante b_{xx} du tenseur d'Eshelby et le champ de contrainte de von Mises. La plastification du matériau γ commence à partir de la figure 5.12(h).

En regard de l'évolution de ces champs, la figure 5.11 montre l'évolution du saut de la composante b_{xx} . Jusqu'à plastification, la valeur de ce saut est négative et diminue. Ensuite, à partir de la plastification la valeur moyenne du saut devient croissante. Lorsque la plastification advient, l'estimation de $\llbracket b_{xx} \rrbracket$ est particulièrement mauvaise. Ensuite, à mesure que prend place l'écoulement plastique, le calcul du saut s'améliore. La force motrice continue alors d'augmenter avec la température.

Bien que les résultats présentés ici soient simples, voir simplistes, il est toutefois intéressant de constater que la plastification des matériaux a un impact non négligeable sur la force motrice. Par voie de conséquence, la plastification du matériau devrait aussi modifier sensiblement la propagation du front de changement de phase.

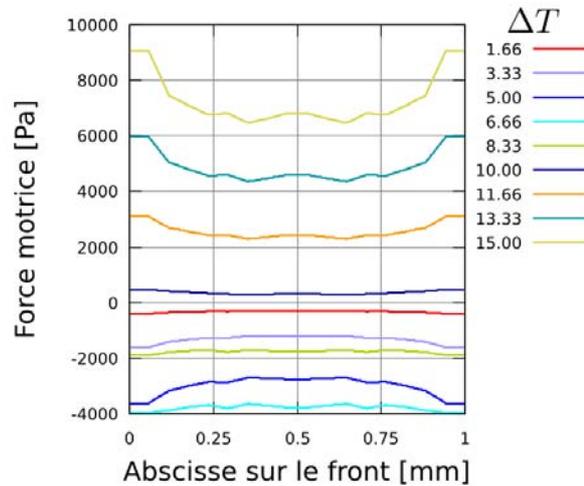


FIG. 5.11 – Evolution de la force motrice au fur et à mesure du chargement en température.

5.5 Conclusions-perspectives

En conjonction avec le calcul mécanique X-FEM, nous avons mis en place une méthode permettant le calcul de la force motrice sur le front au travers d'une intégrale indépendante du contour.

Il a alors été nécessaire d'introduire un repérage du front pour le calcul des forces motrice sur le front en association avec le calcul mécanique. Pour les contours fermés, l'utilisation d'un enrichissement saut permet d'obtenir les bonnes propriétés pour l'obtention d'un repérage curviligne.

Le calcul des forces motrices *via* une intégrale indépendante du contour donne des résultats satisfaisants, mis à part sur les extrémités de la discrétisation du front.

Physiquement, il est intéressant de noter que le passage de l'état élastique à l'état plastique pour un cas représentatif du changement de phase diffusif prenant place dans le 16MND5, amène un changement de l'orientation de la force motrice.

Il faut désormais essayer d'appliquer ce calcul de force motrices sur des géométries de front plus complexes, ce qui donnera tout son intérêt au calcul par intégrale indépendante.

Une fois cette validation effectuée, il sera possible de faire des simulations de changement de phase en reliant la vitesse du front à l'état mécanique du matériau. Cette mise en relation pourra être effectuée par l'utilisation de données macroscopiques, notamment en utilisant l'équation 1.5 présentée au chapitre 1 et permettant d'obtenir la vitesse moyenne du front en fonction de la fraction de phase transformée.

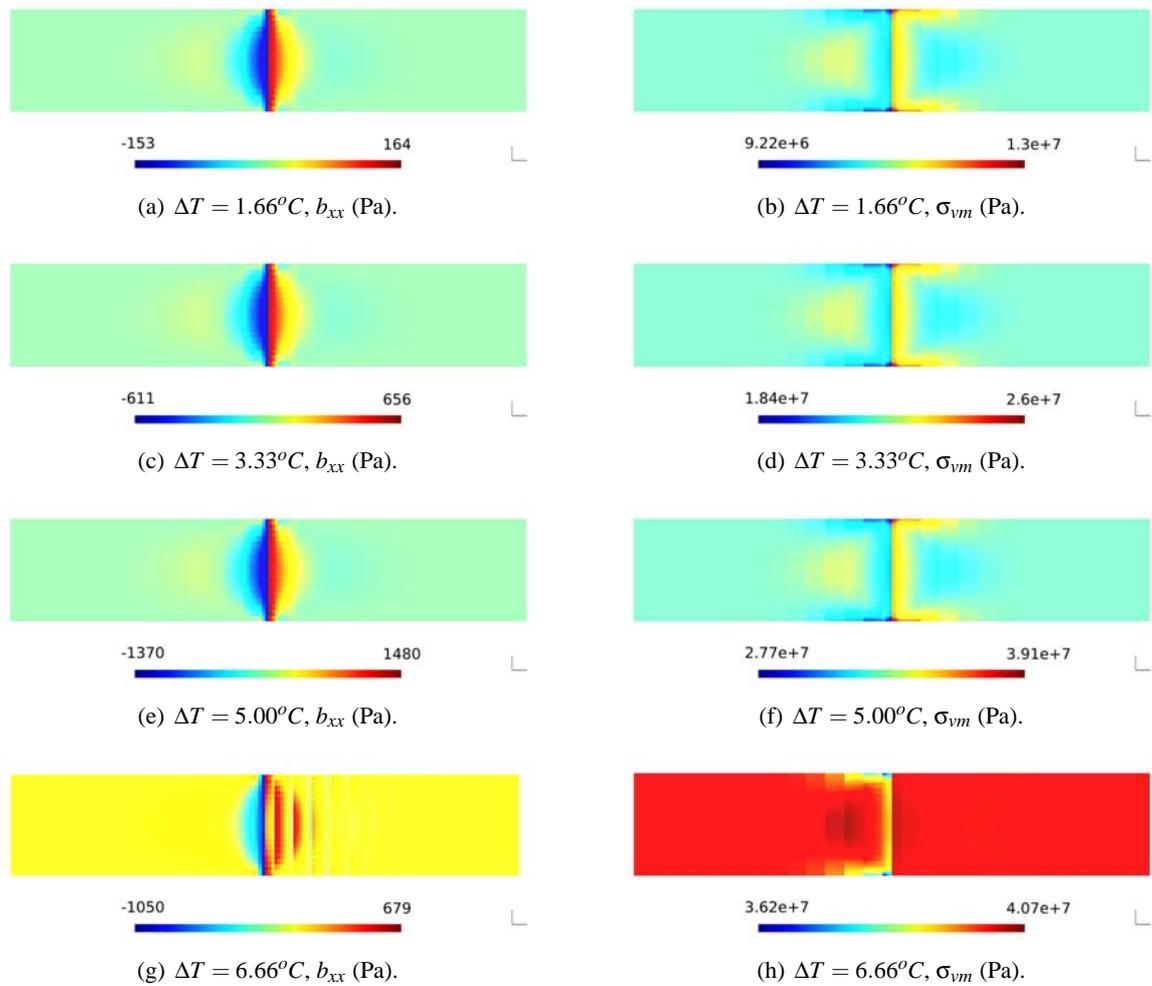


FIG. 5.12 – Evolution des champs b_{xx} et σ_{vm} (contrainte de von Mises) au fur et à mesure du chargement, avant plastification.

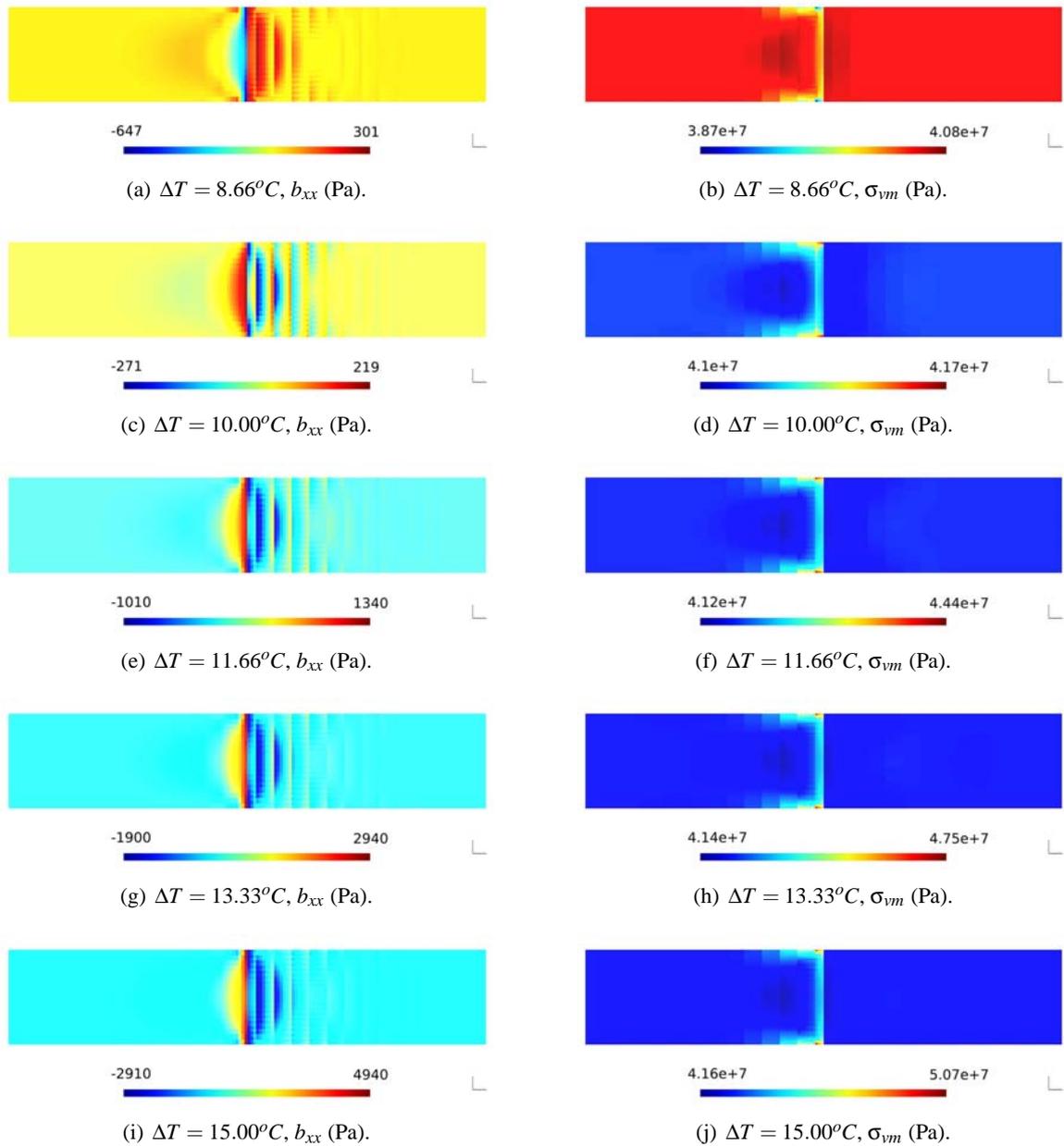


FIG. 5.13 – Evolution des champs b_{xx} et σ_{vm} (contrainte de von Mises) au fur et à mesure du chargement, après plastification.

Conclusions - perspectives

Lors de la première partie de ce mémoire nous nous sommes attachés à montrer plusieurs points de vue, classé par échelle, sur les changements de phase allotropiques dans les aciers. Cette étude préliminaire nous a permis de fixer d'une part une échelle d'étude, c'est à dire mésoscopique, tenant compte de la description explicite d'un front de transformation, mais incluant un matériau homogénéisé au sens de la mécanique des milieux continus et de la théorie de la plasticité.

Cette échelle définie, nous avons mis au point et utilisé un ensemble expérimental autorisant l'observation du champ de déplacement en surface pour un acier subissant un changement de phase martensitique. Cette mesure dynamique locale du champ de déplacement nous a permis de construire une typologie de l'évolution de la déformation pendant le changement de phase martensitique. Nous avons en particulier pu isoler deux régimes. L'explication de la présence de ces deux régimes rejoint une hypothèse faite lors d'un travail précédent tenant compte de la difficulté de déformation dans un acier sous contrainte hydrostatique. A partir d'une hypothèse sur la signification d'une norme du champ de déformation ainsi mesuré, nous avons pu reconstruire ce que l'on suppose être l'évolution topologique des phases jusqu'à 45% de phase transformée.

Ensuite, nous avons abordé la modélisation du comportement plastique *via* une théorie éprouvée. Il a été choisi de porter notre attention sur un modèle contrainte plane représentatif des essais réalisés dans la partie expérimentale. La discrétisation utilise un schéma proposé par de Borst. Nous avons par ailleurs défini dans cette partie le coefficient de dilatation à utiliser lors du passage de la phase mère à la phase fille.

La partie suivante présente de nouvelles techniques numériques, principalement dans le cadre des éléments finis étendus, permettant la modélisation de la topologie des phases pendant la transformation, ainsi que la production de la fonction d'enrichissement associée pour le calcul mécanique X-FEM. Ces méthodes ont été appliquées pour simuler un cas test représentatif, pour le chargement et les propriétés matériau, de la transformation diffusive du 16MND5 au chauffage.

Enfin, nous avons abordé le problème du calcul numérique du saut du tenseur d'Eshelby sur le front de changement de phase. Bien que le couplage entre ce calcul de saut et la propagation n'a pas été effectué, nous avons montré au travers d'un essai simple la variation de la force motrice suivant la plastification ou non de la phase austénitique.

Concernant la partie expérimentale, le travail doit être étendu suivant plusieurs directions. La première est la réalisation d'observations à chaud, pour le changement de phase austénitique. Ces observations pourront se faire en adoptant un traitement adéquat de la surface de l'éprouvette permettant la corrélation du champ de déplacement, soit par l'observation dans le spectre infrarouge. Parallèlement, l'observation avec des systèmes optiques perfectionnés, en particulier microscope longue distance, permettrait d'avoir une meilleure résolution spatiale pour le champ de déplacement et ainsi de vérifier les hypothèses conduisant à l'identification des phases.

Par ailleurs, lorsque ces investigations supplémentaires auront été réalisées, il sera possible de

s'intéresser à l'influence de la contrainte sur le changement de phase, en particulier sur l'évolution topologique des phases.

Concernant la partie numérique, la prochaine étape consistera à relier les développements effectués pour la modélisation du support de discontinuité au calcul mécanique élasto-plastique dans le cadre X-FEM, particulièrement pour simuler des transformations pilotées par force motrice.

D'autre part, l'algorithme de retour radial doit être adapté pour la réalisation de simulations en association avec les essais, plus particulièrement un calcul élasto-plastique initialisé avec l'identification de topologie.

L'un des autres points à développer est l'impact de la présence de plusieurs discontinuités sur le calcul des forces motrices au front. En effet, il faudrait regarder précisément les conséquences sur l'intégrale indépendante du contour de la présence de plusieurs contours sur le saut calculé.

A plus long terme, l'approche proposée devra permettre l'identification, en relation avec les essais de la relation constitutive entre force motrice et avancée du front. La détermination de cette force motrice sera capitale dans la compréhension de l'influence de la cohérence du front de changement de phase sur les propriétés de propagation.

Pour la partie simulation, les développements à plus long terme devront porter sur l'identification de l'impact sur la structure d'un changement de phase localisé. Cette modélisation pourra par exemple passer par l'utilisation de méthodes multi-échelles. Le domaine pourrait alors être sous découpé selon les parties affectées ou non par le changement de phase. Localement, pour les parties affectées par le changement de phase, des simulations par les méthodes présentées dans ce mémoire permettraient d'atteindre une description correcte du changement de phase.

Annexe A

Simulation de l'état mécanique homogénéisé lors d'un changement de phase allotropique

Cette annexe présente l'article [VAL 07] hors du cadre de la thèse. Dans ce travail, les hypothèses topologiques du modèle de leblond pour la modélisation de la plasticité de transformation ont été étendues. En particulier, cette amélioration permet de tenir compte de l'état hydrostatique de la phase mère en fin de transformation. Les prédictions du modèle sont alors comparées avec des essais macroscopiques pour des chargements complexes.



Available online at www.sciencedirect.com



European Journal of Mechanics A/Solids 26 (2007) 460–473



Strain simulation of steel during a heating-cooling cycle including solid-solid phase change

S. Valance, M. Coret, A. Combescure *

INSA/LaMCoS, UMR/CNRS 5514, Bât. J. d'Alembert, 20, av A. Einstein, 69621 Villeurbanne Cedex, France

Received 9 December 2005; accepted 13 November 2006

Available online 26 December 2006

Abstract

Designed for the simulation of transformation induced plasticity in steels occurring on cooling, the model first proposed by Leblond in the middle of 80's works well for constant uni-axial stress test. But further experimental investigation have shown that for non-proportional multi-axial test, the quality of the model is worse. The purpose of this paper is to improve this model through the removal of the hypothesis that plastic flow for the Greenwood–Johnson mechanism occurs only in the 'weaker' phase. The improvement, leading to better agreement, enables to use the model on cooling, and shows that for TRIP plastic flowing in harder phase is almost important, even if it is lower than in the 'weak' phase.

© 2006 Elsevier Masson SAS. All rights reserved.

Keywords: Transformation induced plasticity (TRIP); Solid phase transformation; Greenwood and Johnson effect; Leblond's model

1. Introduction

The model presented below is applied to the simulation of transformation induced plasticity (TRIP) for low carbon steels. Material behavior taken into account are elastic with either ideal plasticity or linear kinematic hardening. The focus of this model is to relate stress, temperature and phase proportion to strain during the transformation.

For steels undergoing a solid-solid phase transformation, TRIP appears. This phenomenon is a plastic flow occurring when an external load is applied during the transformation. This occurs even if this load is small regarding yield stress of the 'weaker' phase. Greenwood and Johnson (1965) and Magee (1970) give two complementary explanations to this phenomenon:

- orientation of the local plastic flow due to phase volume incompatibility by external loading (Greenwood and Johnson mechanism);
- preferred orientation of the martensite plates arising from the external loading (Magee mechanism).

From a metallurgical point of view, Greenwood and Johnson mechanism is related to diffusional transformation and Magee effect is related to displacive transformation occurring for martensitic transformation involving Bain strain.

* Corresponding author. Tel.: +33 04 72 43 64 26.

E-mail address: alain.combescure@insa-lyon.fr (A. Combescure).

Bibliographie

- [AGR 92] AGRICOLAE G.
De Re Metallica. Gérard Klopp, 1992. traduit de l'édition originale de 1556 par Albert France-Lanord.
- [AHR 04] AHRENS U., MAIER H., MAKSOUD A.
Stress affected transformation in low alloy steels—factors limiting prediction of plastic strains. *J. Phys. IV France*, vol. 120, 2004, p. 615–623.
- [BAB 97] BABUŠKA I., MELENK J.
The partition of unity method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 40, n° 4, 1997, p. 727–758.
- [BEL 01] BELYTSCHKO T., MOES N., USUI S., PARIMI C.
Arbitrary discontinuities in finite elements. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, vol. 50, 2001, p. 993–1013.
- [BHA] BHADSHIA H.
Worked examples in the geometry of crystals.
- [BOR 90] DE BORST R., FEENSTRA P.
Studies in anisotropic plasticity with reference to the hill criterion. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 29, 1990, p. 315–336.
- [BOR 91] DE BORST R.
The zero-normal-stress condition in plane-stress and shell elastoplasticity. *Comm. in. Appl. Numer. Methods*, vol. 7, 1991, p. 29–33.
- [CHE 04] CHESSA J., BELYTSCHKO T.
Arbitrary discontinuities in space–time finite elements by level sets and X-FEM. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, vol. 61, 2004, p. 2595–2614.
- [COR 02] CORET M., CALLOCH S., COMBESURE A.
Experimental study of the phase transformation plasticity of 16MND5 low carbon steel under multiaxial loading. *International Journal of Plasticity*, vol. 18, n° 12, 2002, p. 1707–1727.
- [ESH 51] ESHELBY J.
The Force on an Elastic Singularity. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 244, n° 877, 1951, p. 87–112.
- [ESH 57] ESHELBY J.
The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 241, n° 1226, 1957, p. 376–396.

- [FAB 97] FABBRI M., VOLLER V.
The Phase-Field Method in the Sharp-Interface Limit : A Comparison between Model Potentials. *Journal of Computational Physics*, vol. 130, n° 2, 1997, p. 256–265.
- [FIS 90] FISCHER F.
A micromechanical model for transformation plasticity in steels. *Acta Mater.*, vol. 38, n° 8, 1990, p. 1536–1546.
- [FOM 96] FOMETHE A., MAUGIN G.
Material forces in thermoelastic ferromagnets. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, vol. 8, n° 5, 1996, p. 275–292.
- [GAN 93] GANGHOFFER J., DENIS S., GAUTIER E., SIMON A., S.SJÖSTRÖM
Finite element calculation of the micromechanics of a diffusional transformation. *Eur. J. Mech. A/Solids*, vol. 12, n° 1, 1993, p. 21–32.
- [GRE 65] GREENWOOD G., JOHNSON R.
The deformation of metals under small stresses during phase transformations. *Proc. R. Soc.*, vol. 283, 1965, p. 403–422.
- [GRO 00] GROSTABUSSIAT-PETIT S.
Conséquence mécanique des transformations structurales dans les alliages ferreux. Thèse, INSA Lyon, Décembre 2000.
- [GUI] GUIRALDENQ P.
Diffusion dans les métaux. *Techniques de l'ingénieur - traité matériaux métalliques*, vol. M55.
- [HOU 99] HOU T., ROSAKIS P., LEFLOCH P.
A level-set approach to the computation of twinning and phase-transition dynamics. *Journal of Computational Physics*, vol. 150, n° 2, 1999, p. 302–331.
- [HUG 89] HUGHES T., FRANCA L., HULBERT G.
A new finite element formulation for computational fluid dynamics : VIII. The Galerkin/least-squares method for advective-diffusive equations. *COMP. METHODS APPL. MECH. ENG.*, vol. 73, n° 2, 1989, p. 173–189.
- [IWA 04] IWAMOTO T.
Multiscale computational simulation of deformation behavior of TRIP steel with growth of martensitic particles in unit cell by asymptotic homogenization method. *International Journal of Plasticity*, vol. 20, n° 4-5, 2004, p. 841–869.
- [KIE 00] KIENZLER R., HERRMANN G.
Mechanics in Material Space : with applications to defect and fracture mechanics. 2000.
- [LEB 86a] LEBLOND J., MOTTET G., DEVAUX J.
A theoretical and numerical approach to the plastic behaviour of steels during phase transformations I. Derivation of general relations. *Jal. Mech. Phys. Solids*, vol. 34, n° 4, 1986, p. 395–409.
- [LEB 86b] LEBLOND J., MOTTET G., DEVAUX J.
A theoretical and numerical approach to the plastic behaviour of steels during phase transformations II. Study of classical plasticity for ideal-plastic phases. *Jal. Mech. Phys. Solids*, vol. 34, n° 4, 1986, p. 411–432.
- [LEB 89a] LEBLOND J., DEVAUX J., DEVAUX J.
Mathematical modelling of transformation plasticity in steel I. Case of ideal-plastic phases. *Int. Jal. Plas.*, vol. 5, 1989, p. 551–572.

- [LEB 89b] LEBLOND J., DEVAUX J., DEVAUX J.
Mathematical modelling of transformation plasticity in steel II. Coupling with strain hardening phenomena. *Int. J. Plasticity*, vol. 5, 1989, p. 573–591.
- [MAG 66] MAGEE C.
Transformation kinetics, microplasticity and aging of martensite in FE31Ni. Phdthesis, Carnegie Inst. Technologie, Pittsburg PA, 1966.
- [MAG 70] MAGEE C.
Nucleation of martensite, phases transformations. ASM, Metals Park, oh édition, 1970.
- [MAU 95a] MAUGIN G., TRIMARCO C.
On material and physical forces in liquid crystals. *International Journal of Engineering Science*, vol. 33, n° 11, 1995, p. 1663–1678.
- [MAU 95b] MAUGIN G., TRIMARCO C.
The dynamics of configurational forces at phase-transition fronts. *Meccanica*, vol. 30, n° 5, 1995, p. 605–619.
- [MAU 98] MAUGIN G.
On shock waves and phase-transition fronts in continua. *ARI-An International Journal for Physical and Engineering Sciences*, vol. 50, n° 3, 1998, p. 141–150.
- [MER 02] MERLE R., DOLBOW J.
Solving thermal and phase change problems with the eXtended finite element method. *Computational Mechanics*, vol. 28, n° 5, 2002, p. 339–350.
- [MOE 99] MOES N., DOLBOW J., BELYTSCHKO T.
A finite element method for crack growth without remeshing. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, vol. 46, n° 1, 1999, p. 131–150.
- [MOË 03] MOËS N., CLOIREC M., CARTRAUD P., REMACLE J.
A computational approach to handle complex microstructure geometries. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 192, n° 28-30, 2003, p. 3163–3177.
- [MOE 06] MOES N., BECHET E., TOURBIER M.
Imposing essential boundary conditions in the extended finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, , 2006.
- [MOU 05] MOURAD H., DOLBOW J., GARIKIPATI K.
An assumed-gradient finite element method for the level set equation. *Int J Numer Methods Eng*, vol. 64, 2005, p. 1009–1032.
- [MUE 02] MUELLER R., MAUGIN G.
On material forces and finite element discretizations. *Computational Mechanics*, vol. 29, n° 1, 2002, p. 52–60.
- [NAG 01] NAGAYAMA K., TERASAKI T., TANAKA K., FISCHER F., ANTRETTER T., CAILLETAUD G., AZZOUEZ F.
Mechanical properties of a Cr-Ni-Mo-Al-Ti maraging steel in the process of martensitic transformation. *Materials Science and Engineering A.*, vol. A308, 2001, p. 25–37.
- [OSH 88] OSHER S., SETHIAN J.
Fronts propagating with curvature-dependent speed- Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, vol. 79, n° 1, 1988, p. 12–49.

- [RAJ 00] RAJARAM H., SOCRATE S., PARKS D.
Application of domain integral methods using tetrahedral elements to the determination of stress intensity factors. *Engineering Fracture Mechanics*, vol. 66, n° 5, 2000, p. 455–482.
- [RÉT 04] RÉTHORÉ J., GRAVOUIL A., COMBESURE A.
A stable numerical scheme for the finite element simulation of dynamic crack propagation with remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 193, n° 42-44, 2004, p. 4493–4510.
- [SAT 72] SATOH K.
Thermal Stresses Developed in High-Strength Steels Subjected to Thermal Cycles Simulating Weld Heat-Affected Zone. *Transactions of the Japan Welding Society*, vol. 3, n° 1, 1972, p. 135–142.
- [SET 99] SETHIAN J.
Level set methods and fast marching methods. Cambridge University Press Cambridge, 1999.
- [SUK 01] SUKUMAR N., CHOPP D., MOES N., BELYTSCHKO T.
Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 190, n° 46, 2001, p. 6183–6200.
- [TAL ed] TALEB L., SIDOROFF F.
Micromechanical modelling of Greenwood-Johnson mechanism in transformation induced plasticity. *Int. J. Plas.*, , To be published.
- [TAN 03] TANAKA K., TERASAKI T., GOTO S., FISCHER F., ANTRETTETTER T., CAILLETAUD G.
Effect of back stress evolution due to martensitic transformation on iso-volume lines in a Cr-Ni-Mo-Al-Ti maraging steel. *Materials Science and Engineering A.*, vol. A341, 2003, p. 189–196.
- [TRU 87] TRUSKINOVSKY L.
Dynamics of non-equilibrium phase boundaries in a heat conducting nonlinear elastic medium. *J. Appl. Math. Mech.(PMM)*, vol. 51, 1987, p. 777–784.
- [VAL 07] VALANCE S., CORET M., COMBESURE A.
Strain simulation of steel during a heating-cooling cycle including solid-solid phase change. *European journal of mechanics. A. Solids*, vol. 26, n° 3, 2007, p. 460–473.
- [VEN 06] VENTURA G.
On the elimination of quadrature subcells for discontinuous functions in the eXtended Finite-Element Method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 66, n° 5, 2006, p. 761–795.
- [VIN 02] VINCENT Y.
Simulation numérique des conséquences métallurgiques et mécaniques induites par une opération de soudage. Thèse, INSA Lyon, 2002.