



**HAL**  
open science

# Modélisation des effets d'échelle en plasticité cristalline : comparaison entre la mécanique des milieux continus généralisés et la dynamique des dislocations

Anaïs Gaubert, Hyung Jun Chang, Samuel Forest

## ► To cite this version:

Anaïs Gaubert, Hyung Jun Chang, Samuel Forest. Modélisation des effets d'échelle en plasticité cristalline : comparaison entre la mécanique des milieux continus généralisés et la dynamique des dislocations. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. 8 p. ; Clé USB. hal-00592927

**HAL Id: hal-00592927**

**<https://hal.science/hal-00592927>**

Submitted on 3 May 2011

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

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

# Modélisation des effets d'échelle en plasticité cristalline : comparaison entre la mécanique des milieux continus généralisés et la dynamique des dislocations

A. Gaubert<sup>1</sup>, H.J. Chang<sup>2</sup>, S. Forest<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Onera DMSM-MCE, Châtillon, France, anais.gaubert@onera.fr*

<sup>2</sup> *Centre des Matériaux, MINES ParisTech, CNRS UMR7733, France, {hyung-jun.chang,samuel.forest}@ensmp.fr*

**Résumé** — Le durcissement par précipitation fait l'objet de nombreuses études, tant par Dynamique de Dislocations Discrètes (DDD) que par des modèles continus de Mécanique des Milieux Continus Généralisés (MMCG). Cependant, jusqu'à présent peu de comparaisons DDD/MMCG en 3D ont été publiées. L'apport de ce travail porte donc sur cet aspect 3D dans un premier temps mais nous montrons également que les modèles de MMCG permettent de distinguer la formation de bandes de glissement et de bandes en genou (kink bands en anglais), ce que la plasticité cristalline classique ne permet pas.

**Mots clés** — Durcissement par précipitation, Dynamique des dislocations, Modèle micromorphe.

## Introduction

Dans le cadre de la plasticité cristalline, le durcissement par précipitation, i.e. le durcissement lié à la présence de précipités plus durs au sein d'une matrice élasto-plastique, est communément associé à une augmentation de la limite d'élasticité. Le durcissement peut être, en partie, expliqué par la formation de structures de dislocations autour des particules et à la présence de dislocations d'accommodation géométrique (Geometrically Necessary Dislocations, GND [1]). De telles microstructures de dislocations ont également été mises en évidence expérimentalement [2].

De nombreux modèles numériques ont été développés récemment dans le but de caractériser les structures de GND autour de particules [3]. Parmi eux, nous pouvons citer les modèles de Mécanique des Milieux Continus Généralisés (MMCG). Les modèles de plasticité à gradient [4] (Strain Gradient Plasticity, SGP) basés sur le tenseur densité de GND  $\underline{\Gamma}$  font partie de cette classe de modèles,  $\underline{\Gamma}$  pouvant être défini par la relation :  $\underline{\Gamma} = -\text{curl} \underline{H}^p = \text{curl} \underline{H}^e$  où  $\underline{H}^e$  et  $\underline{H}^p$  sont respectivement les tenseurs de déformation élastique et plastique. Des relations ont été établies entre les équations constitutives des modèles de MMCG et la formation d'empilement de dislocations à l'interface entre une matrice élasto-plastique et des précipités élastiques [5]. Cependant, dans la plupart de ces études, les simulations sont en 2D de sorte qu'aucune relation n'a pu être dérivée dans un cadre 3D.

La Dynamique de Dislocations Discrètes (DDD) traite elle directement les lignes de dislocations et par conséquent permet d'accéder aux microstructures de dislocations et aux densités de GND résultant d'interactions collectives entre dislocations. Les simulations par DDD, qu'elles soient 2D ou 3D, décrivent de manière physique la plasticité cristalline. L'enjeu de notre travail consiste donc à établir un pont entre l'origine physique de la plasticité et les modèles continus. Une telle approche a déjà été appliquée au problème du durcissement par précipitation en 3D mais sans description détaillée des structures de dislocations autour des particules [6].

Cette contribution a donc pour objectif de comparer les résultats de simulations par DDD [7] et SGP [8] dans le cas d'un arrangement périodique de particules sphériques entourées d'une matrice monocristalline sous un chargement de cisaillement pur. Le comportement plastique de la matrice est décrit par un unique système de glissement. Ce choix doit être compris comme une première étape dans la compréhension du durcissement par précipitation en 3D. Les simulations par DDD montrent que les microstructures de dislocations dépendent fortement de l'orientation du système de glissement par rapport aux particules ; c'est pourquoi deux orientations sont étudiées ici. Le modèle SGP utilisé est basé sur l'approche micromorphe, approche qui consiste à ajouter des degrés de liberté (DOF) supplémentaires

au classique champ de déplacement. Le lecteur comprendra donc tout l'enjeu numérique de telles simulations pour lesquelles chaque nœud possède 12 DOF et chaque point de Gauss possède également un nombre important de variables internes même dans les cas relativement simples traités ici.

La première section de cette contribution présente brièvement le modèle SGP utilisé, le modèle *microcurl* [8]. Dans une seconde section sont décrites les configurations étudiées. La troisième section propose une comparaison et une discussion des résultats obtenus par les simulations par DDD et les simulations Eléments Finis (EF) en plasticité cristalline classique et en SGP. Enfin, dans une quatrième section nous proposons des idées prospectives d'amélioration du modèle *microcurl* avant de conclure.

## 1 Présentation du modèle *microcurl*

Le modèle de SGP utilisé dans ce travail et que cette section décrit brièvement est présenté plus en détail dans [8]. Il consiste en une extension de la plasticité cristalline micropolaire [9] qui s'avère être une approche numériquement efficace d'implémentation de la plasticité à gradient. Une variable de micro-déformation plastique  $\chi^p$ , tenseur d'ordre 2 non symétrique, distincte de la déformation plastique  $H^p$  qui, elle, est toujours traitée en qualité de variable interne, est introduite comme DOF. Les DOF du modèle *microcurl* sont donc au nombre de 12 par nœud :  $DOF = \{\underline{u}, \chi^p\}$ .

Nous faisons l'hypothèse que seule la partie rotationnelle du gradient de  $\chi^p$  joue un rôle dans la puissance des forces internes, d'où :

$$p^{(i)} = \underline{\sigma} : \dot{H} + \underline{s} : \dot{\chi}^p + \underline{M} : \text{curl} \dot{\chi}^p. \quad (1)$$

où  $\underline{\sigma}$  est le tenseur des contraintes,  $\underline{s}$  le tenseur des micro-contraintes et  $\underline{M}$  le tenseur des doubles contraintes. L'application du principe des puissances virtuelles conduit aux équations d'équilibre suivantes :

$$\text{div} \underline{\sigma} = 0, \quad \text{curl} \underline{M} + \underline{s} = 0 \quad (2)$$

et aux conditions aux limites correspondantes :  $\underline{t} = \underline{\sigma} \cdot \underline{n}$ ,  $\underline{m} = \underline{M} \cdot \underline{\xi} \cdot \underline{n}$  où  $\underline{t}$  et  $\underline{m}$  sont le vecteur contrainte et les doubles forces surfaciques à l'interface et  $\underline{\xi}$  le tenseur de Levi-Civita. Le tenseur des contraintes est calculé à partir de la partie symétrique de  $H^e$  grâce à la loi de Hooke.

Pour la définition des équations constitutives, la fonctionnelle d'énergie libre est supposée dépendre des arguments suivants :  $\psi(\underline{\xi}^e, \underline{e}^p := H^p - \chi^p, \underline{K} := \text{curl} \chi^p)$  où  $\underline{e}^p$  est la déformation plastique relative. Elle permet de mesurer la différence entre la déformation plastique  $H^p$  et la micro-déformation plastique  $\chi^p$ . L'utilisation du second principe et de l'inégalité de Clausius-Duhem permet d'écrire les équations constitutives suivantes :

$$\underline{\sigma} = \underline{\Lambda} : \underline{\xi}^e, \quad \underline{s} = -H_\chi \underline{e}^p, \quad \underline{M} = A \underline{K}, \quad (3)$$

où  $H_\chi$  (dimension : MPa) et  $A$  (dimension : MPa.mm<sup>2</sup>) sont des modules généralisés. Dans [8], le rôle du paramètre  $H_\chi$  est expliqué en détail ; il doit être pris suffisamment grand si l'on veut que la déformation plastique  $H^p$  et la micro-déformation plastique  $\chi^p$  coïncident.

La règle d'écoulement, permettant de calculer le glissement  $\gamma$  sur le système considéré, est basée sur un critère de Schmid généralisé :

$$|\underline{\tau} + \underline{s} : (\underline{l} \otimes \underline{n})| = \tau_c \quad (4)$$

où  $\tau_c$  est la scission résolue critique. L'équation (4) montre qu'un écrouissage cinématique apparaît naturellement dans la fonction de charge. Un potentiel viscoplastique de type Norton permet de calculer le glissement  $\gamma$  et par conséquent  $H^p$ . Dans [8] nous montrons sur un cas simple que ces équations de comportement relativement simples engendrent un écrouissage cinématique linéaire dont le module dépend de la taille de la microstructure.

Ce modèle a été implémenté dans le code EF ZéBuLoN. Un solveur implicite est utilisé pour résoudre les équations d'équilibre. En revanche, l'intégration des équations de comportement est réalisée à l'aide d'un schéma Runge-Kutta d'ordre 4 à pas de temps adaptatif.

## 2 Configurations étudiées

Les deux configurations étudiées ici sont représentées par la figure 1. Des conditions aux limites périodiques sont utilisées tant pour les simulations par DDD que pour les simulations par EF. Les axes

$X1$ ,  $X2$  et  $X3$  représentent le repère géométrique (global) du motif de particules. Un second repère cristallographique est utilisé pour représenter le réseau cristallin de matrice entourant les particules. La fraction volumique et le rayon des précipités sont respectivement 15% et  $0.5 \mu\text{m}$ . Les constantes élastiques des deux phases sont isotropes :  $\mu = 27\,000 \text{ MPa}$  et  $\nu = 0.347$ . Le système de glissement choisi pour la plasticité dans la matrice correspond au système B4 de la classification de Schmid et Boas :  $\underline{b} = 1/2[\bar{1}01]$ ,  $\underline{n} = 1/2(111)$ .

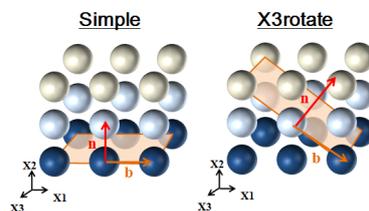


FIG. 1 – Configurations étudiées, cas 1 ("simple") à gauche et cas 2 ("X3rotate") à droite. Elles diffèrent par l'orientation entre le motif de particules et le système de glissement de la matrice (rotation d'un angle de  $45^\circ$  autour de l'axe  $X3$  pour le cas 2).

Le premier cas, dénommé "simple" sur la figure 1 va favoriser la formation d'empilements de dislocations vis et coins autour des particules qui sont séparées d'une distance de  $0.5 \mu\text{m}$ . De plus, cette configuration présente des couloirs de matrice libres de tout obstacle au glissement des dislocations dont la largeur est elle aussi d'environ  $0.5 \mu\text{m}$ . Le second cas, la configuration "X3rotate" 1, va favoriser la formation d'empilements de dislocations vis et coins mais la distance entre particules vue par les dislocations est plus grande que dans le cas 1. Cette configuration présente également la particularité de réduire les couloirs de matrice libres d'obstacles à une largeur de  $0.2 \mu\text{m}$ . La présence de couloirs de matrice libres d'obstacles pour les dislocations réduit le durcissement induit par la présence de particules. Dans cette situation, les simulations 2D [10] montrent un comportement parfaitement plastique sans effet de taille significatif. L'apport de simulations 3D apparaît alors puisque, dans ce cas, on peut s'attendre à des interactions plus complexes entre les dislocations mobiles et donc des distributions de GND plus complexes. De plus, les simulations 2D se concentrent uniquement sur des segments de dislocations coins purs et infinis alors que les simulations 3D prennent en compte la courbure des lignes de dislocations et les effets de tension de ligne.

### 3 Résultats et discussion

#### 3.1 Résultats des simulations par DDD

Les conditions initiales des simulations par DDD sont les suivantes : plusieurs sources de Frank-Read de  $0.1 \mu\text{m}$  de longueur sont dispersées aléatoirement au sein du volume élémentaire représentatif. La densité de dislocations initiale est fixée à  $8.10^{12} \text{ m}^{-2}$ . Le glissement dévié des dislocations n'est pas autorisé. Le choix de constantes élastiques isotropes et identiques pour les deux phases implique qu'il n'y a pas de forces images.

Les résultats des simulations par DDD sont analysés en traçant la microstructure de dislocations selon deux plans bien particuliers : un plan de normale  $(1\bar{2}1)$  a été choisi de sorte à observer les composantes coins des dislocations et un plan complémentaire de normale  $(\bar{1}01)$  va permettre de mettre en évidence les parties vis des microstructures de dislocations ; ces deux plans passant par le centre de la particule. La figure 2 montre les résultats obtenus par DDD après une déformation appliquée moyenne  $\epsilon_{12}$  de 0.005. Les points rouges et roses représentent respectivement les segments coins positifs et négatifs des dislocations ; les points jaunes et verts représentent respectivement les segments vis positifs et négatifs.

Dans le cas 1, seulement quelques pile-ups sont observés autour de la particule, les couloirs de matrice horizontaux concentrant l'activité des dislocations, i.e. le glissement plastique. Seules quelques dislocations mobiles sont observées dans ces couloirs. Ces résultats rejoignent ceux de [10] en 2D.

La situation est différente dans le cas 2 pour lequel des structures de dislocations remarquables sont observées. Nous pouvons toujours distinguer les couloirs libres de précipités (moins larges que dans le

cas 1 comme cela a été noté dans la section 2) mais nous observons également la présence de murs de dislocations bien visibles sur la vue des dislocations coins. Les deux zones, bornées par les dislocations coins de signe opposés (murs rouges et roses) peuvent être interprétées comme des “kink bands”, i.e. des bandes de cisaillement perpendiculaires à la direction de glissement. Cette combinaison de bandes de glissement et de kink bands conduit à une localisation de la déformation qui accommode la contrainte de cisaillement appliquée [11, 12]. Les microstructures de dislocations associées aux composantes coins et vis sont très différentes. Les dislocations coins conduisent à des murs verticaux et aucune activité remarquable n’est observée dans les couloirs libres de précipités. Les segments vis eux s’accumulent horizontalement au dessus et en dessous de la particule. La formation d’une telle microstructure de dislocations s’explique par les interactions entre dislocations. Dans [13], ces interactions sont finement analysées. Les deux cas mènent, macroscopiquement, à un écrouissage linéaire dû à l’absence volontaire de glissement dévié.

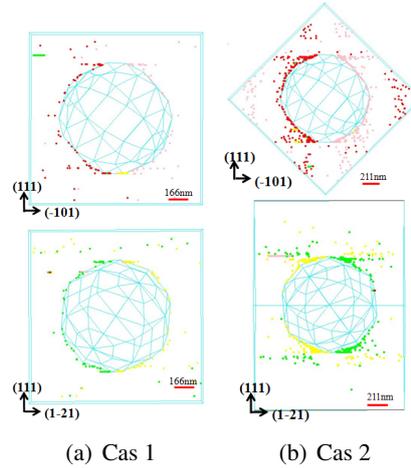


FIG. 2 – Structures de dislocations coins (haut) et vis (bas) autour de la particule obtenues par DDD dans les cas 1 et 2. Les images sont des coupes de la boîte de simulation, sachant que la particule est toujours représentée en 3D.

### 3.2 Résultats des simulations par EF

Des simulations comparables ont été menées par EF, en utilisant dans un premier temps la plasticité cristalline classique (sans écrouissage) puis le modèle *microcurl*. Deux maillages différents ont dû être utilisés. Le maillage utilisé pour les calculs classiques compte 50 803 noeuds et 282 848 éléments linéaires tétraédriques. Ce maillage très fin n’a pas pu être utilisé pour les calculs de SGP étant donné le nombre élevé de DOF et de variables internes que comporte le modèle *microcurl*. Un maillage plus grossier (27 568 éléments, correspondant à un problème à 64 194 DOF) a donc dû être utilisé. Les calculs EF sont également périodiques ; des conditions de périodicité sont imposées sur le champ de déplacement (et la micro-déformation plastique dans le cas du modèle *microcurl*) sur les bords des maillages utilisés.

Nous avons choisis les valeurs suivantes pour les paramètres plastiques :  $\tau_c = 60$  MPa,  $k = 10$  MPa.s<sup>1/n</sup>,  $n = 1$ . Les paramètres viscoplastiques ont été choisis de sorte que le comportement de la matrice s’apparente à un comportement de plasticité indépendante du temps. Le précipité a un comportement élastique. Quant aux paramètres généralisés du modèle *microcurl*, les valeurs retenues sont les suivantes :  $H_\chi = 400\,000$  MPa et  $A = 0.3$  MPa.mm<sup>2</sup> dans la matrice et  $A = 3 \cdot 10^{-4}$  MPa.mm<sup>2</sup> pour les particules, conduisant à une longueur interne  $l_s = \sqrt{A/H_\chi}$  égale à 0.9  $\mu$ m pour la matrice. Cette longueur intrinsèque donne un ordre de grandeur des tailles de microstructures pour lesquelles le modèle produit des effets d’échelle. Les résultats de ces simulations sont présentés par la figure 3. Le choix d’un comportement élastique parfaitement plastique pour la matrice conduit au développement de bandes de déformation où celle-ci est très importante comme le montre les figures 3(a) et (c). Le glissement est encore plus important à l’intersection des bandes de glissement et des kink bands dans le cas 2. Les bandes de glissement prédites par la plasticité classique sont en accord qualitatif avec les simulations par DDD,

cependant l'intensité du glissement est la même dans les bandes de glissement et les kinks bands.

En revanche, les simulations réalisées en MMCG, i.e. à l'aide du modèle *microcurl* (cf. figures 3(b) et (d)), avec les paramètres  $A$  choisis, montrent un comportement différent des bandes de glissement et des kink bands. Ceci est dû au fait que le glissement dans les kink bands verticales induit une rotation de réseau non-homogène et donc une densité de GND non nulle. D'après les relations élastiques généralisés, les contraintes d'ordre supérieur augmentent dans les kink bands, ce qui conduit à un écrouissage cinématique linéaire [8]. Le résultat de ces niveaux de contraintes augmentant localement dans les kink bands près de l'inclusion est un glissement limité dans ces zones tandis qu'un glissement plastique non limité peut se développer dans les bandes de glissement horizontales. C'est pourquoi, dans le cas 1 (figure 3(b)), les bandes verticales ont presque disparu au profit des bandes de glissement horizontales. C'est également le cas dans la configuration 2 pour laquelle un glissement plus faible est observé dans les bandes verticales.

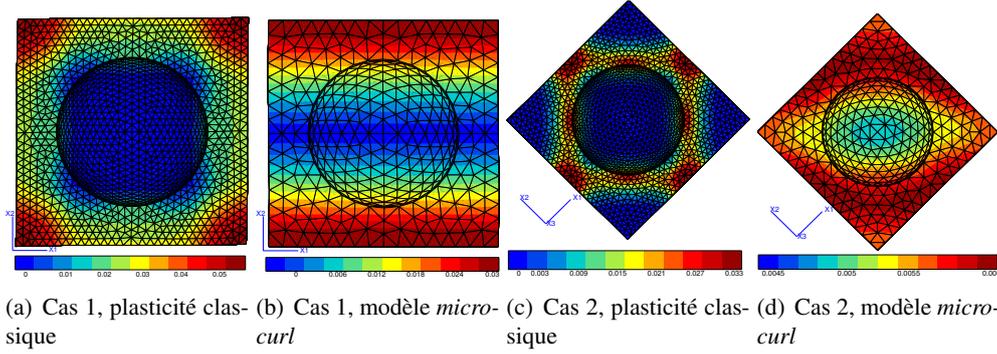


FIG. 3 – Isovaleurs du glissement plastique  $\gamma$  dans un plan coupant le milieu de l'inclusion perpendiculairement à l'axe  $X_3$  dans les cas 1 ("simple") et 2 (" $X_3$ rotate"). L'orientation des axes  $X_1, X_2, X_3$  correspond à l'orientation du cas 1. L'inclusion a été retirée dans le but d'observer la distribution du glissement autour de la particule.

Pour aller plus loin, la densité de GND a été évaluée qualitativement en calculant une densité de GND que nous avons défini par :  $\|\text{curl}\tilde{\chi}^p\| = \sqrt{\text{curl}\tilde{\chi}^p : \text{curl}\tilde{\chi}^p}$ .  $\tilde{\chi}^p$ , en tant que DOF, est défini dans le repère  $X_1, X_2, X_3$  du maillage (global). Dans ces conditions, la composante la plus importante est  $\chi_{12}^p$  dont le profil s'apparente à celui du glissement  $\gamma$  (cf. figure 3);  $\chi_{11}^p$  et  $\chi_{13}^p$  étant également non nuls. Par conséquent, le tenseur  $\text{curl}\tilde{\chi}^p$  possède deux composantes ayant une valeur significative :  $K_{11} = (\text{curl}\tilde{\chi}^p)_{11} = \chi_{12,3}^p - \chi_{13,2}^p$  et  $K_{13} = (\text{curl}\tilde{\chi}^p)_{13} = \chi_{11,2}^p - \chi_{12,1}^p$ ; une troisième composante,  $K_{12} = (\text{curl}\tilde{\chi}^p)_{12}$  étant non nulle mais négligeable devant les deux autres composantes. La figure 4(a) montre que l'estimation de la densité de GND est maximale à l'intérieur de la particule, le maillage étant trop grossier pour distinguer cette quantité dans la matrice. Associée à la figure 4(b) qui présente  $M_{13}$  (relié linéairement à  $K_{13}$ ), ce résultat montre un accord qualitatif avec les simulations par DDD. En effet, les GND s'accroissent autour de l'inclusion avec une densité plus importante vers le haut et le bas de celle-ci. De plus, le signe des GND, que l'on peut évaluer sur la figure 4(b) est également en accord avec le signe des dislocations bloquées autour du précipité issu des simulations par DDD.

## 4 Améliorations du modèle *microcurl*

Le modèle *microcurl* utilisé ici reste un modèle très simple et souffre de nombreuses limitations. La première, la plus évidente, est qu'il prévoit un écrouissage cinématique linéaire [8]. De plus, dans cette même contribution [8], nous avons mis en évidence des discontinuités sur certaines composantes du tenseur  $\chi^p$ , qui, rappelons le, sont DOF du modèle *microcurl*, lorsque plusieurs systèmes de glissements sont introduits. De telles discontinuités ne sont pas forcément problématiques mais tendent à montrer que le modèle possède, en un certain sens, trop de DOF. Dans cette section, nous proposons donc deux améliorations du modèle *microcurl*. Dans un premier temps, nous proposons une démarche originale dans le monde des modèles de SGP pour obtenir un écrouissage cinématique non linéaire puis, dans un second temps, une généralisation du modèle *microcurl* est envisagée.

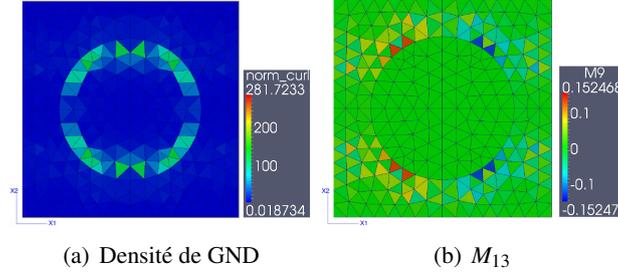


FIG. 4 – Isovaleurs de la densité de GND (cf. texte pour sa définition) (a) et de  $M_{13}$  (b) dans le cas 1 pour une valeur de  $A = 10^{-2}$  MPa.m<sup>2</sup> dans la matrice et  $A = 10^{-7}$  MPa.m<sup>2</sup> pour le précipité. Sur ces figures, la particule n’a pas été retirée.

#### 4.1 Ecrouissage cinématique non linéaire et effet sur le seuil de plasticité

La structure générale du modèle *microcurl*, décrite au début de cette contribution est conservée. En particulier les DOF et donc les équations d’équilibre et conditions aux limites restent inchangées. Une nouvelle variable interne  $\tilde{K}_{vi}$ , reliée à  $\tilde{K} = \text{curl}\chi^p$  par l’équation différentielle :

$$\dot{\tilde{K}}_{vi} = \dot{\tilde{K}} - D_k \tilde{K}_{vi} \quad (5)$$

est ajoutée. Cette manière d’introduire une non-linéarité s’inspire de la loi d’évolution de l’écrouissage cinématique non linéaire due à Chaboche [14]. D’autres alternatives existent dans la littérature de la plasticité à gradient. Certains auteurs décomposent  $\text{curl}\tilde{\chi}^p$  en une partie énergétique et une partie dissipative, [15] par exemple. Nous supposons que la fonctionnelle d’énergie libre dépend des variables suivantes :  $\psi(\xi^e, e^p := \dot{H}^p - \chi^p, \tilde{K}_{vi})$ . L’écriture de l’inégalité de Clausius–Duhem conduit aux équations constitutives suivantes :  $\tilde{\sigma} = \tilde{\Lambda} : \xi^e$ ,  $\tilde{s} = -H_\chi e^p$  et  $\tilde{M} = A \tilde{K}_{vi}$ . Par conséquent, le taux de dissipation s’écrit maintenant :  $D = (\tilde{\sigma} + \tilde{s}) : \dot{H}^p + \tilde{M} : D_k \tilde{K}_{vi} \geq 0$ , ou, en substituant l’expression de  $\tilde{M}$  :  $D = (\tilde{\sigma} + \tilde{s}) : \dot{H}^p + A \tilde{K}_{vi} : D_k \tilde{K}_{vi} \geq 0$ . Cette équation montre que, bien que  $\text{curl}\tilde{\chi}^p$  reste purement énergétique dans l’approche proposée, une dissipation d’énergie liée aux tenseurs  $\tilde{K}_{vi}$  et  $\tilde{M}$  apparaît. Elle montre également que le coefficient matériau  $D_k$  doit être pris positif pour que le taux de dissipation soit positif.

Ce modèle a été testé sur une microstructure périodique composée d’une alternance d’une phase élasto-plastique et d’une phase dure élastique, microstructure déjà étudiée en détail dans [5, 8]. Ce matériau est soumis à un cisaillement pur. Un seul système de glissement, tel que  $\underline{b} = [100]$  et  $\underline{n} = (010)$ , est considéré. Plusieurs tailles de microstructure ont été simulées. La figure 5 montre que l’on obtient bien un écrouissage cinématique non-linéaire. Ce qui est également très intéressant est qu’un effet sur le seuil de plasticité semble apparaître en comparant les courbes contrainte-déformation pour plusieurs tailles de microstructure (figure 5(b)). Cet effet sur le seuil de plasticité est discutable dans la mesure où, pour les tailles de microstructure les plus faibles, nous retrouvons un comportement bi-linéaire. Il n’en reste pas moins que ce modèle pourrait permettre de reproduire de manière très satisfaisante les effets d’échelle observés expérimentalement dans les superalliages à base de nickel monocristallins par exemple pour des variations de taille de microstructure relativement faibles (tailles des précipités comprises entre environ 300 nm et 1  $\mu$ m).

#### 4.2 Vers un modèle plus général : le modèle *micrograd*

Le modèle de SGP développé et utilisé dans ce travail, dit *microcurl*, part de l’hypothèse que seule la partie rotationnelle du tenseur de micro-déformation plastique intervient dans la puissance des efforts internes. Une généralisation de ce modèle consiste à intégrer le gradient complet de  $\chi^p$  dans la puissance des efforts internes :  $p^{(i)} = \tilde{\sigma} : \dot{H} + \tilde{s} : \dot{\chi}^p + \tilde{M} : \nabla \dot{\chi}^p$ . Dans la suite nous noterons  $\nabla \dot{\chi}^p = \dot{\tilde{K}}$ . L’écriture des puissances s’exerçant sur un élément de volume et la méthode des puissances virtuelles sont utilisées pour dériver les équations d’équilibre généralisées :  $\text{div}\tilde{\sigma} = 0$  et  $\text{div}\tilde{M} + \tilde{s} = 0$ , ainsi que les conditions aux limites associées :  $\underline{t} = \tilde{\sigma} \cdot \underline{n}$ ,  $\underline{m} = \tilde{M} \cdot \underline{n}$  où  $\underline{t}$  et  $\underline{m}$  sont respectivement les tractions simples et doubles à

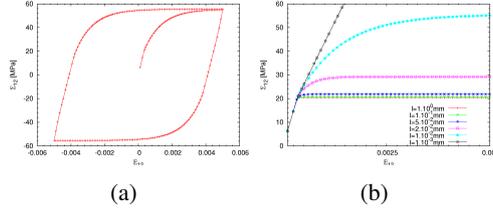


FIG. 5 – (a) Courbe contrainte–déformation pour une taille de microstructure  $l = 10^{-2}$  mm (cf. [8] pour la définition de  $l$ ). (b) Comparaison de la réponse macroscopique pour plusieurs tailles de microstructures.

la frontière. La même démarche que celle suivie pour la définition des équations constitutives du modèle *microcurl* et de son extension non-linéaire proposée au paragraphe précédent est suivie. La fonctionnelle d'énergie libre de Helmholtz est donc supposée dépendre des variables suivantes :  $\psi(\xi^e, e^p := \underline{H}^p - \underline{\chi}^p, \underline{K})$ . On en déduit les relations suivantes :  $\underline{\sigma} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \xi^e}$ ,  $\underline{s} = -\rho \frac{\partial \psi}{\partial e^p}$  et  $\underline{M} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \underline{K}}$ . La loi reliant  $e^p$  et  $\underline{s}$  est la même que dans le modèle *microcurl* (eq. (3)). Concernant la relation entre  $\underline{K}$  et  $\underline{M}$ , nous avons choisi d'introduire deux paramètres permettant de contrôler la part relative de la partie rotationnelle et la partie non-rotationnelle de  $\nabla \underline{\chi}^p$ . En se basant sur le travail de Mindlin [16] sur les milieux micromorphes et en vérifiant que la fonctionnelle d'énergie libre est bien définie positive, cette relation peut s'écrire

$$\underline{M} = A \underline{\varepsilon} \text{curl} \underline{\chi}^p + B \underline{K}^T, \quad M_{ijk} = A \varepsilon_{jkm} (\text{curl} \underline{\chi}^p)_{im} + B K_{ikj} \quad (6)$$

où  $\underline{K}^T$  est la transposée de l'écriture matricielle du tenseur d'ordre 3  $\underline{K}$  sur les deux dernier indices. Pour que la fonctionnelle d'énergie libre soit définie positive, les coefficients  $A$  et  $B$  doivent respecter les conditions  $A - B > 0$  et  $-A < B < A$ .

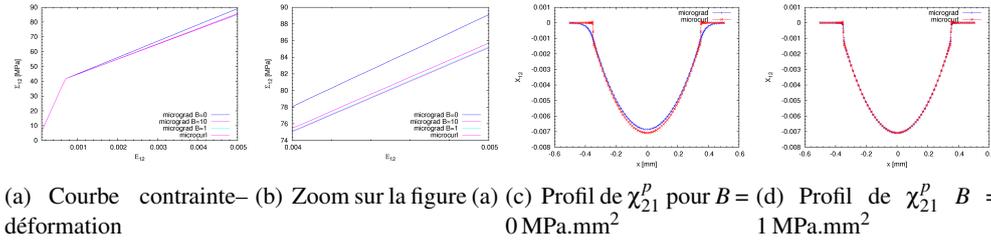


FIG. 6 – Résultats du modèle *micrograd* en glissement double symétrique.

Les premiers résultats obtenus avec ce modèle *micrograd* ont été réalisés sur la même microstructure qu'au paragraphe précédent sous les mêmes conditions de chargement mais en glissement double symétrique cette fois :  $\underline{b}_1 = [0.8660, 0.5, 0.]$ ,  $\underline{n}_1 = (-0.5, 0.8660, 0.)$  et  $\underline{b}_2 = [0.8660, -0.5, 0.]$ ,  $\underline{n}_2 = (0.5, 0.8660, 0.)$  afin de comparer avec le modèle *microcurl* pour lequel la composante  $\chi_{21}^p$  est discontinue à l'interface entre les deux phases [8]. Les paramètres matériau choisis sont :  $H^k = 100\,000$  MPa,  $A = 100$  MPa.mm<sup>2</sup> pour les deux phases. Trois valeurs du paramètre  $B$  ont été testées :  $B = 0$  MPa.mm<sup>2</sup> (même rôle des parties rotationnelle et non-rotationnelle du gradient de la micro-déformation plastique),  $B = 10$  MPa.mm<sup>2</sup> et  $B = 1$  MPa.mm<sup>2</sup> (pondération entre parties rotationnelle et non-rotationnelle du gradient de la micro-déformation plastique). La figure 6 montre les résultats macroscopiques (figures 6(a) et (b)) et les profils de  $\chi_{21}^p$  pour  $B$  nul et  $B = 1$  MPa.mm<sup>2</sup> comparés aux réponses du modèle *microcurl*. Nos conclusions sur ces premiers résultats sont les suivantes : le modèle *micrograd* permet bien d'obtenir un tenseur  $\underline{\chi}^p$  complètement continu ; un rapport  $A/B$  de 100 permet de retrouver les résultats macroscopiques et le profil de  $\chi_{21}^p$  du modèle *microcurl* ; un coefficient  $B$  nul conduit à un module d'écroutissage plus important, traduisant des interactions perpendiculairement au plan de glissement. La continuité des DOF n'est pas nécessaire. Certains auteurs imposent des conditions de saut aux interfaces, ces lois pouvant d'ailleurs être identifiées à partir de simulations à l'échelle atomique [17].

## Conclusions et perspectives

Cette contribution a montré les capacités des modèles de MMCG à reproduire au moins qualitativement la physique de la plasticité par des comparaisons de simulations par DDD et par EF. Cependant, les cas traités ici sont simplistes dans la mesure où de nombreux mécanismes de glissement et d'interactions entre dislocations ont volontairement été omis. Des calculs par DDD plus réalistes coûtent très cher en temps calcul pour atteindre 0.2% de déformation plastique [18]. Le développement de modèles continus prend alors tout son sens. Mais, pour que ces modèles soient pertinents physiquement, des comparaisons telles que celles présentées ici sont nécessaires. Ainsi, nos efforts porteront sur la vérification de la validité des améliorations proposées en section 4 par des comparaisons DDD/EF ainsi que sur l'amélioration de l'implémentation des modèles de MMCG dans le code EF ZéBuLoN afin de pouvoir effectuer des simulations de MMCG sur des maillages plus fins.

## Références

- [1] M.F. Ashby, *Deformation of plastically non-homogeneous materials*, Philosophical Magazine, vol 21, no 170, "399-424, 1970.
- [2] F.J. Humphreys, *Local lattice rotations at second phase particles in deformed metals*, Acta Metallurgica, vol 27, pp 1801–1814, 1979.
- [3] V. Taupin, S. Berbenni, C. Fressengeas, O. Bouaziz, *On particle size effects : an internal length mean field approach using field dislocation mechanics*, Acta Materialia, vol 58, pp, 5532–5544, 2010.
- [4] P. Cermelli, M.E. Gurtin, *On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol 49, pp 1539–1568, 2001.
- [5] S. Forest, R. Sedláček, R., *Plastic slip distribution in two-phase laminate microstructures : Dislocation-based vs. generalized-continuum approaches*, Philosophical Magazine A, vol 83, pp 245–276, 2003.
- [6] C.S. Shin, C. S. M.C Fivel, M. Verdier, K.H. Oh, *Dislocation-impenetrable precipitate interaction : a three-dimensional discrete dislocation dynamics analysis*, Philosophical Magazine, vol 83, pp3691–3704, 2003.
- [7] M. Verdier, M. Fivel, I. Groma, *Mesosopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals : Principles and applications*, Modelling Simul. Mat. Sci. Eng., vol 6, pp 755–770, 1998.
- [8] N.M. Cordero, A. Gaubert, S. Forest, E. Busso, F. Gallerneau, S. Kruch, *Size effects in generalised continuum crystal plasticity for two-phase laminates*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol 58, pp 1963–1994, 2010.
- [9] J.R. Mayeur, D.L. McDowell, D.J. Bammann, *Dislocation-based micropolar single crystal plasticity : Comparison of multi- and single criterion theories*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol 59, pp 398–422, 2011.
- [10] J.L. Bassani, A. Needleman, E. Van der Giessen, *Plastic flow in a composite : a comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation predictions*, Int. J. Solids Structures, vol 38, pp 833–853, 2001.
- [11] S. Forest, *Modeling Slip, Kink and Shear Banding in Classical and Generalized Single Crystal Plasticity*, Acta Materialia, vol 46, no 9, pp 3265–3281, 1998.
- [12] D. Kuhlmann-Wilsdorf, *Regular deformation bands (DBs) and the LEDS hypothesis*, Acta Materialia, vol 47, pp 1697–1712, 1999.
- [13] H.J. Chang, A. Gaubert, M. Fivel, S. Berbenni, O. Bouaziz, S. Forest, *Analysis of particle induced dislocation structures using three-dimensional dislocation dynamics and strain gradient plasticity* accepté, Computational Materials Science.
- [14] J. Lemaître, J.L. Chaboche, *Mécanique des matériaux solides*, Dunod, 1985.
- [15] L. Anand, M.E. Gurtin, S.P. Lele, C. Gething, *A one-dimensional theory of strain-gradient plasticity : Formulation, analysis, numerical results*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol 53, no 8, pp 1789–1826, 2005.
- [16] R.D. Mindlin, *Micro-structure in linear elasticity*, Archive for Rational Mechanics and Analysis, vol 16, no 1, pp 51–78, 1964.
- [17] D.L. McDowell, *Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials*, Materials Science and Engineering, vol 62, pp 67–123, 2008.
- [18] A. Vattré, *Durcissement des superalliages monocristallins : des mécanismes physiques à la modélisation continue*, Thèse de doctorat Ecole des Mines ParisTech, 2009.