



HAL
open science

Intégration de la loi de comportement d'un monocristal CFC

Mohamed Bettaieb, Olivier Débordes, Abdelwaheb Dogui

► **To cite this version:**

Mohamed Bettaieb, Olivier Débordes, Abdelwaheb Dogui. Intégration de la loi de comportement d'un monocristal CFC. 7e colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2005, Giens, France. hal-01812902

HAL Id: hal-01812902

<https://hal.science/hal-01812902>

Submitted on 11 Jun 2018

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.

Public Domain

Intégration de la loi de comportement d'un monocristal CFC

Mohamed Bettaieb^{***}, Olivier Débordes^{*} et Abdelwaheb Dogui^{**}

^{*}LMA & EGIM, IMT, Technopôle Château-Gombert, F13383 Marseille Cedex 13, (bettaieb debordes)@mn.esm2.imt-mrs.fr,

^{**}LGM, ENIM, 5019 Monastir, Tunisie, abdel.dogui@enim.rnu.tn

RÉSUMÉ. Nous développons un algorithme numérique pour intégrer la loi de comportement d'un monocristal CFC tridimensionnel en grandes transformations élastoplastiques avec écrouissage anisotrope, sous certaines approximations que l'on précisera. La base mécanique de cet algorithme est la règle de consistance ou de cohérence alors que la base numérique est l'étude des problèmes linéaires complémentaires connus historiquement sous le nom de LCP. Nous abordons également le problème de non unicité de solution et nous proposons une méthode de perturbation pour le surmonter.

ABSTRACT. We develop a numerical algorithm able, under some approximations which we specify, to compute the response of a FCC single crystal in the field of large elastic-plastic transformations with anisotropic work hardening. The mechanical base of this algorithm is the consistency conditions whereas the numerical base is the study of the linear complementary problems historically known under the name of LCP. We also approach the problem of non unicity of solution and we propose a method to surmount it.

MOTS-CLÉS : monocristal CFC, loi de comportement, grandes transformations élastoplastiques, écrouissage anisotrope.

KEY WORDS: FCC single crystal, behavior law, large elastic-plastic transformation, anistoropic work hardening.

1. Introduction

Initié il y a près de 70 ans par Taylor et Sachs, le concept d'homogénéisation permet de modéliser les changements d'échelles géométriques afin de mieux comprendre et de mieux représenter le comportement mécanique de matériaux métalliques polycristallins en tenant compte des mécanismes de déformation des grains.

Dans cette approche, l'étape principale à l'échelle du grain (monocristal) repose sur la modélisation théorique (§ 2.1) et numérique (§ 2.2) de la loi de comportement du grain, en grandes transformations élastoplastiques pour les applications envisagées, dans le cas de matériaux CFC avec écrouissage anisotrope. Afin d'éviter tout artefact numérique, on explicite (§ 2.2.1) soigneusement les trois approximations faites ; les deux premières sont classiques, et la troisième (approximation a priori de la loi d'écrouissage par une fonction affine par morceaux) permet de linéariser le problème à résoudre sur chaque pas de temps. L'éventuelle non unicité de solution est traitée en introduisant une petite perturbation des cissions critiques initiales, perturbation qu'on peut interpréter comme résultant d'une imperfection matérielle ou d'un faible écrouissage anisotrope antérieur.

Enfin, on étudie (§ 3) l'influence de cette perturbation sur la réponse d'un monocristal et comment elle se répercute sur celle d'un polycristal homogénéisé selon Taylor.

2. Modélisation

2.1. Modélisation mécanique

L'indice supérieur t désigne le temps, et pourra être combiné avec d'autres indices supérieurs. On adopte la décomposition multiplicative du gradient de la transformation f^t en parties élastique f^{et} et plastique f^{pt} , f^{et} étant décomposée en une rotation r^t , telle que les tenseurs d'orientation \bar{M}_g des systèmes de glissement soient ceux à l'instant initial, et une déformation pure v^{et} . Pour respecter l'objectivité, la loi de comportement est écrite dans le repère lié à r^t , et on surlignera toutes les grandeurs exprimées dans ce repère. Sous l'hypothèse des petites déformations élastiques, la cinématique générale s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} f^t &= v^{et} r^t \bar{f}^{pt} & l^t &= \dot{\bar{f}}^t f^{-t} & \bar{l}^t &= r^{tT} l^t r^t \\ \bar{d}^t &= (\bar{l}^t)_S = \bar{d}^{et} + \bar{d}^{pt} & \bar{w}^t &= (\bar{l}^t)_A = r^{tT} \dot{\bar{f}}^t + \bar{w}^{pt} \end{aligned} \quad [1]$$

Pour un monocristal CFC, les taux de déformation et de rotation résultent de la contribution des glissements sur les différents systèmes orientés \bar{M}_g :

$$\forall g = 1, \dots, 24 \quad \bar{d}^{pt} = \sum_{g=1}^{24} \dot{\gamma}_g^t (\bar{M}_g)_s \quad \bar{w}^{pt} = \sum_{g=1}^{24} \dot{\gamma}_g^t (\bar{M}_g)_A \quad \dot{\gamma}_g^t \geq 0 \quad [2]$$

Les parties élastique et plastique (loi de Schmid) de la loi de comportement sont :

$$\forall g = 1, \dots, 24 \quad \dot{\mathcal{E}}^t = \bar{C} : \bar{d}^{et} \quad \tau_g^t = \bar{\sigma}^t : \bar{M}_g \leq \tau_g^{ct} \quad \text{et} \quad \dot{\gamma}_g^t > 0 \Rightarrow \tau_g^t = \tau_g^{ct} \quad [3]$$

avec la loi d'érouissage (exponentielle décroissante) suivante ([Abd 98]) :

$$\forall g = 1, \dots, 12 \quad \tau_{g+12}^{ct} = \tau_g^{ct} = \tau_g^{c0} + \frac{Q}{b} \sum_{s=1}^{12} H_{gs} (1 - e^{-b \int_0^t (\dot{\gamma}_s^t + \dot{\gamma}_{s+12}^t) dt'}) \quad [4]$$

2.2. Modélisation numérique

2.2.1. Données du problème, approximations

On suppose connues les constantes matérielles (Q , b , H (matrice de Franciosi, dépendante de 6 coefficients h_1 à h_6), τ_g^{c0} , E et ν), les conditions σ^{t_0} , r^{t_0} et γ^{t_0} au début d'un pas de temps $I^\Delta = [t_0, t_0 + \Delta t]$ et le gradient des vitesses eulériennes l^t sur ce pas. On fait trois approximations numériques : les deux premières sont naturelles dans un schéma d'Euler sur le temps, et la troisième permet de linéariser le système différentiel [1] à [4] :

- sur I^Δ , l^t est approché par $l = l^{t_0 + \Delta t/2}$;
- sur $I^\delta = [t_0, t_0 + \delta t]$ de longueur inconnue, \bar{l}^t est approché par $\bar{l} = r^{t_0 T} l r^{t_0}$;
- la fonction $x \rightarrow e^{-x}$ est approchée (à η près en norme infinie, en pratique nous prenons $\eta = 10^{-3}$) par une approximation continue et affine par morceaux : on note θ_u la pente de cette approximation sur le u -ème morceau $[x_u, x_{u+1}]$.

La relation [4] est ainsi remplacée par

$$u(s) \text{ tel que } \gamma_s^{t_0} + \gamma_{s+12}^{t_0} \in [x_{u(s)}, x_{u(s)+1}] \quad [5]$$

$$\tau_g^{ct} = \tau_g^{ct_0} - Q \sum_{s=1}^{12} H_{gs} \theta_{u(s)} (\gamma_s^t + \gamma_{s+12}^t - \gamma_s^{t_0} - \gamma_{s+12}^{t_0})$$

et on imposera (première condition sur δt) que la longueur δt de I^δ soit telle que, pour aucun des systèmes de glissement, il n'y ait changement de morceau. Le système constitué des équations [1], [2], [3] et [5] est linéaire et pour l'intégrer d'une manière exacte, nous suivrons la méthode décrite ci-dessous.

2.2.2. Résolution

Introduisons l'ensemble P des systèmes potentiellement actifs, connu à t_0 :

$$P = \{ g \in \{1, \dots, 24\} \ ; \ \bar{\sigma}^{t_0} : \bar{M}_g = \tau_g^{ct_0} \} \quad [6]$$

et on imposera (deuxième condition sur δt) qu'aucun nouveau système de glissement ne devienne actif durant I^δ . Si $P = \emptyset$, le comportement est purement élastique, donc les $\dot{\gamma}_g^t$ sont nuls ; sinon, la condition de consistance s'écrit sur I^δ :

$$\forall g \in P \quad \dot{\gamma}_g^t \geq 0 \quad \dot{\phi}_g^t = \dot{\gamma}_g^{ct} - \dot{\gamma}_g^t \geq 0 \quad \dot{\phi}_g^t \dot{\gamma}_g^t = 0 \quad [7]$$

En posant $i' = i$ si $i \leq 12$ et $i' = i - 12$ sinon, la dérivation par rapport au temps de [5] et celle de la définition [3] de τ_g^t donnent, en utilisant [2] et [3] :

$$\forall g \in P \quad \dot{\gamma}_g^{ct} = -Q \sum_{s \in P} \theta_{g's'} H_{g's'} \dot{\gamma}_s^t \quad [8]$$

$$\forall g \in P \quad \dot{\gamma}_g^t = \dot{\mathcal{E}}^t : \bar{M}_g = \bar{M}_g : \bar{C} : \bar{d}^{et} = \bar{M}_g : \bar{C} : \bar{d} - \bar{M}_g : \bar{C} : \sum_{s \in P} \dot{\gamma}_s^t \bar{M}_s \quad [9]$$

En combinant [7], [8] et [9], on obtient :

$$\forall g \in P \quad \dot{\gamma}_g^t \geq 0 \quad \dot{\phi}_{i(g)}^t = \sum_{s \in P} A_{i(g)i(s)} \dot{\gamma}_s^t - Z_{i(g)} \geq 0 \quad \sum_{g \in P} \dot{\phi}_{i(g)}^t \dot{\gamma}_g^t = 0 \quad [10]$$

avec, $i(g)$ désignant le rang dans P du système de glissement g ,

$$\forall g, s \in P \quad A_{i(g)i(s)} = \bar{M}_g : \bar{C} : \bar{M}_s - \theta_{g's'} H_{g's'} \quad Z_{i(g)} = \bar{M}_g : \bar{C} : \bar{d} \quad [11]$$

Le problème [10], connu sous le nom de LCP, admet une solution unique (constante par rapport au temps) dès que la matrice A est définie positive ([Hil 72]). Dans le cas contraire, il peut avoir plusieurs solutions, voire une infinité. Pour choisir une solution, [Ana 96] et [Kno 99] utilisent la pseudoinverse de la matrice A si elle est singulière, ou sinon un critère de minimisation de la puissance dissipée plastiquement (critère qui ne suffit pas toujours à lever l'indétermination).

Nous avons choisi, en cas d'indétermination, d'appliquer une petite perturbation aléatoire et positive aux cissions critiques ; nous avons constaté qu'il suffit de le faire une fois pour que les problèmes [10] ultérieurs admettent une seule solution. Une fois les vitesses (constantes par rapport au temps) de glissement calculées, la vitesse de contrainte $\dot{\mathcal{E}}$ et le taux de déformation élastique \bar{d}^e s'obtiennent par :

$$\dot{\mathcal{E}} = \bar{C} : \bar{d}^e = \bar{C} : (\bar{d} - \sum_{g \in P} \dot{\gamma}_g^t \bar{M}_g) \quad [12]$$

et la longueur δt de I^δ s'obtient au moyen des deux conditions déjà indiquées et de $\delta t \leq \Delta t$. On termine en faisant $t_0 \leftarrow t_0 + \delta t$ et $\Delta t \leftarrow \Delta t - \delta t$.

3. Résultats

On considère un monocristal CFC de caractéristiques matérielles :

$$\begin{aligned} E &= 215 \text{ GPa} & \nu &= 0.3 & \forall g = 1, \dots, 12 & \tau_g^c &= 240 \text{ MPa} \\ Q &= 256 \text{ MPa} & b &= 12.6 & h_1 = h_2 = h_3 = h_4 = h_5 = h_6 &= 1.3 \end{aligned}$$

Avec les conditions initiales $\sigma^0 = 0$ et $r^0 = Id$, on impose à ce monocristal la cinématique donnée par $l_{11} = 2$, $l_{22} = l_{33} = -1$ et $l_{ij} = 0$ pour $i \neq j$; certains résultats seront donnés en fonction de $E_{11} = t l_{11}$ avec $t \in [0, 0.3]$. La figure 1 fait ressortir les écarts entre la solution par pseudo-inversion de A et la solution par perturbation (ici de 10^{-3} en valeurs relatives) des cisssions critiques initiales; on constate en particulier que le travail dissipé plastiquement est plus faible par perturbation. La figure 2 (a) et (b) fait toutefois ressortir une certaine sensibilité à la perturbation appliquée.

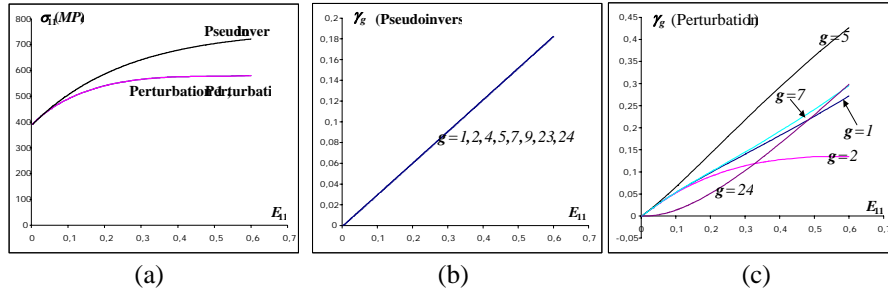


Figure 1. Différence entre les solutions par pseudo-inverse et par perturbation.

On considère ensuite un polycristal constitué de n_g grains, chacun d'eux de données matérielles E , ν , Q , b et h_i comme ci-avant, d'orientations initiales r^0 aléatoires, et de cisssions critiques initiales perturbées comme indiqué. En changeant de perturbations on obtient p versions différentes du même polycristal, et en changeant d'orientations initiales on obtient n_e essais différents. On calcule alors la contrainte homogénéisée (modèle de Taylor) Σ^i correspondant à la i -ème version (avec $i = 1, \dots, p = 10$) d'un même essai et on calcule ensuite la variance normalisée des Σ^i pour cet essai, définie par (σ^d désigne le déviateur de σ) :

$$S = \frac{1}{J(\bar{\Sigma})\sqrt{p-1}} \sqrt{\sum_{i=1}^p J^2(\Sigma^i - \bar{\Sigma})} \quad \bar{\Sigma} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \Sigma^i \quad J(\sigma) = \sqrt{\frac{3}{2} \sigma^d : \sigma^d}$$

et enfin on calcule la variance normalisée moyenne \bar{S} sur les n_e essais. La figure 2 (c) permet de constater que cette sensibilité d'un monocristal aux perturbations s'atténue fortement pour le polycristal avec son nombre de grains.

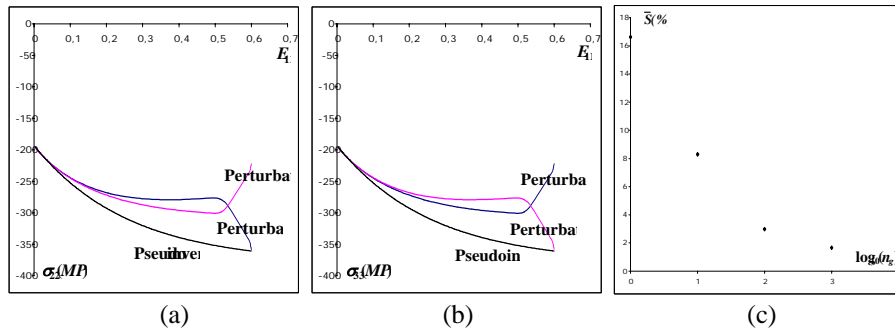


Figure 2. Sensibilité de la réponse du monocristal (a), (b) et du polycristal (c).

4. Conclusion

Les trois approximations du § 2.2.1 permettent d'intégrer exactement les équations [1], [2], [3] et [5] lorsque leur solution est unique. Une méthode simple et efficace, par perturbation des cisssions critiques, permet de traiter radicalement le cas de non unicité. Bien que la réponse du monocristal soit sensible à une telle perturbation, celle d'un polycristal paraît beaucoup plus stable.

Bibliographie

- [Abd 98] Abdul-Latif.A, Dingli.J.ph, Saanouni.K, «Modeling of complex cyclic inelasticity in heterogenous polycrystalline media», *Mechanics of Materials*, vol. 30,1998,pp. 287-305.
- [Ana 96] Anand.L, Kothari.M, «A computational procedure for rate independent crystal plasticity», *J.Mech.Phys.Solids*, vol. 44,1996,pp. 525-558.
- [Hil 72] Hill R., Rice J.R., «Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain», *J.Mech.Phys.Solids*, vol. 20,1972,pp. 401-413.
- [Kno 99] Knockaert.R, Chastel.Y, Massoni.E, «Rate-independent crystalline and polycrystalline plasticity, application to FCC materials », *International Journal of Plasticity*, vol. 16,2000,pp. 179-198.