



HAL
open science

Modélisation élastoplastique du comportement des matériaux métalliques : prise en compte de la microstructure de dislocations

Jamal Fajoui, David Gloaguen, Bruno Courant, Ronald Guillén

► **To cite this version:**

Jamal Fajoui, David Gloaguen, Bruno Courant, Ronald Guillén. Modélisation élastoplastique du comportement des matériaux métalliques : prise en compte de la microstructure de dislocations. CFM 2009 - 19ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2009, Marseille, France. hal-02020896

HAL Id: hal-02020896

<https://hal.science/hal-02020896>

Submitted on 15 Feb 2019

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 élastoplastique du comportement des matériaux métalliques : prise en compte de la microstructure de dislocations

J. FAJOUT^a, D. GLOAGUEN, B. COURANT, R. GUILLEN

a. GeM - Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, UMR CNRS 6183
37, Bd de l'Université - BP406, 44602 St-Nazaire, FRANCE

Résumé :

Nous avons développé des modèles à double transition d'échelles qui ont permis de rendre compte du comportement réel des matériaux lors de chargements complexes (effet Bauschinger). L'hétérogénéisation intragranulaire est mise en évidence par un **écrouissage non local**, qui est représenté dans le cas d'une description biphasée de la structure cellulaire de dislocations. Ces approches ont été validées par des essais expérimentaux (traction-compression, diffraction des rayons X).

Abstract :

A two-level homogenization approach is developed for the micromechanical modelling of the elastoplastic material behaviour during various strain-path changes. The intragranular heterogeneities are taken into account by a new **non-local work-hardening** linked to the two-phase description of dislocation structure. In order to verify the models, different experimental results with complex loading paths on polycrystals have been used here.

Mots clefs : plasticité, dislocations, matériaux cubiques, transition d'échelles, écrouissage non local

1 Introduction

Lors d'une déformation plastique, une structure de dislocations se créent et se déplacent vers les parois et par conséquent leur densité augmente. La microstructure de dislocations est considérée comme un matériau biphasé. Les parois, à forte densité de dislocations et de fraction volumique f_w (w pour « walls »), constituent une phase dure. L'intérieur des cellules, à faible densité de dislocations et de fraction volumique $f_c=1-f_w$ (c pour « cells »), constitue une phase molle. Dans un premier temps, la loi de comportement pour le milieu composite est considérée en tenant compte des différents phénomènes intragranulaires. Ensuite, le comportement du grain est déduit à partir de celui de la microstructure de dislocation (les phases) à travers une première transition d'échelle (**micro-mésomécanique**), en utilisant le modèle de Kröner, ou à travers des nouvelles lois de la densité de dislocations. Enfin, le comportement global du polycristal est déterminé par une transition d'échelle (**méso-macromécanique**) en utilisant le modèle autocohérent.

2 Modélisation du comportement du grain

2.1 Modèle Kröner

Le grain est considéré comme un milieu biphasé, constitué d'une phase molle et d'une autre phase dure, traduisant les hétérogénéités intragranulaires (structures de dislocations). L'élasticité est supposée homogène et isotrope dans le composite et elle est représentée par le tenseur d'élasticité c. La déformation d'ordre deux (II) des grains ϵ^{II} (avec une contrainte σ^{II}) est composée par la déformation élastique (ϵ^{eII}) et la déformation plastique (ϵ^{pII}). Dans le cas d'une élasticité isotrope, les relations de moyenne sur les déformations et les contraintes peuvent s'écrire :

$$\epsilon^{II} = (1-f)\epsilon^w + f\epsilon^c, \quad \sigma^{II} = (1-f)\sigma^w + f\sigma^c \quad \text{et} \quad \epsilon^{pII} = (1-f)\epsilon^{pw} + f\epsilon^{pc} \quad (1)$$

ϵ^w (σ^w) et ϵ^c (σ^c) sont la déformation (contrainte) moyenne dans les parois et les cellules. f est la fraction

volumique des cellules. Les contraintes dans chaque phase s'expriment alors de la façon suivante :

$$\sigma^w = \sigma^{\text{II}} + a^w : (\epsilon^{\text{pw}} - \epsilon^{\text{pc}}) \text{ et } \sigma^c = \sigma^{\text{II}} + a^c : (\epsilon^{\text{pw}} - \epsilon^{\text{pc}}) \quad (2)$$

où a^α sont les tenseurs de localisation donnés par :

$$a^c = \alpha_T (1-f)c : (I - s^{\text{esh}}) \text{ et } a^w = -\alpha_T fc : (I - s^{\text{esh}}) \quad (3)$$

s^{esh} est le tenseur d'Eshelby dépendant de la géométrie de l'inclusion et I désigne le tenseur identité d'ordre 4. α_T est un facteur d'accommodation. Il a été introduit par Berveiller et Zaoui [1] afin d'assurer, de manière approximative, l'accommodation plastique autour de l'inclusion (cellule ou paroi). Pour le calcul du taux de glissement des phases, on utilise ici la formulation développée par Ben Zineb [2] étendue à un milieu biphasé :

$$\dot{\gamma}_\alpha^g = K_\alpha^g (\tau_{c\alpha}^g, \tau_\alpha^g) \dot{\tau}_\alpha^g \quad (4)$$

Les fonctions K_α^g permet de gérer la gestion des systèmes de glissement durant la déformation plastique. Leurs expressions dans le cas de deux phases sont de la forme :

$$K_\alpha^g = \frac{1}{H_{\alpha\alpha}^{\text{gg}}} \left[\frac{1}{2} (1 + \tanh(\tau_\alpha^g)) \right] \left[\frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(k \left(\frac{\tau_\alpha^g}{\tau_{c\alpha}^g} - 1 \right) \right) \right) \right] \left[\frac{1}{2} (1 + \tanh(\dot{\tau}_\alpha^g)) \right] \quad (5)$$

où k est un paramètre du matériau.

Lors d'une déformation plastique, les dislocations se déplacent vers les parois et par conséquent leur densité augmente. Les parois deviennent, ainsi, de plus en plus rigides et leur limite élastique sera plus élevée que celle des cellules. Ce phénomène de durcissement d'une région provoqué par la déformation plastique d'une autre région s'appelle l'érouissage non local [3]. Si on considère le grain comme un milieu homogène, l'évolution du taux de scission critique de chaque phase sur un système g est donnée par :

$$\dot{\tau}_{cc}^g = \sum_h H_{cc}^{\text{gh}} \dot{\gamma}_c^h + \sum_h H_{cw}^{\text{gh}} \dot{\gamma}_w^h \text{ et } \dot{\tau}_{cw}^g = \sum_h H_{wc}^{\text{gh}} \dot{\gamma}_c^h + \sum_h H_{ww}^{\text{gh}} \dot{\gamma}_w^h \quad (6)$$

H_{cc}^{gh} et H_{ww}^{gh} traduisent l'influence locale du système h sur le système g de la même phase. H_{wc}^{gh} et H_{cw}^{gh} désignent l'aspect non local de l'érouissage et l'influence d'une phase sur l'autre. L'évolution et la quantité des dislocations à l'intérieur des cellules sont très faibles par rapport à celle des dislocations présentes dans les parois. Le taux de dislocations dans les parois peut être donné par :

$$\dot{\rho}_w^{\text{g}+} = \frac{1}{bL^g} \dot{\gamma}_c^g - \frac{2y_c}{b} \rho_w^g \dot{\gamma}_w^g \quad (7)$$

où b représente la norme du vecteur de Burgers du matériau. L^g désigne le libre parcours moyen des dislocations dans les cellules sur le système g . La scission critique pour chaque système et pour chaque phase ($\tau_{c\alpha}^g$) est obtenue à l'aide de la densité de dislocations et de la matrice décrivant l'anisotropie des interactions entre les systèmes de glissement g et h (a^{gh}) par :

$$\tau_{c\alpha}^g = \tau_{c0\alpha}^g + \xi \mu b \sqrt{\sum_h a^{\text{gh}} \rho_w^h} \quad (8)$$

où $\tau_{c0\alpha}^g$ est la scission critique initiale de la phase, ξ est une constante qui dépend des interactions élastiques entre dislocations, et, μ représente le module de cisaillement du matériau. En développant l'équation 8, on en déduit la relation suivante :

$$\dot{\tau}_{c\alpha}^g = \frac{\xi\mu}{2\sqrt{\sum_h a^{gh}\rho_w^h}} \frac{a^{gh}}{L^h} \dot{\gamma}_c^h - \frac{y_c \xi\mu}{\sqrt{\sum_h a^{gh}\rho_w^h}} a^{gh} \rho_w^h \dot{\gamma}_w^h \quad (9)$$

En comparant les équations 6 et 9, on déduit ainsi les expressions des H_{wc}^{gh} et H_{ww}^{gh} sous les formes :

$$H_{wc}^{gh} = \frac{\xi^2 \mu^2 b}{2(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g)} \frac{a^{gh}}{L^h} \quad \text{et} \quad H_{ww}^{gh} = -\frac{y_c \xi^2 \mu^2 b}{(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g)} \rho_w^h a^{gh} \quad (10)$$

Les scissions réduites dans les phases sont liées aux contraintes à travers le tenseur de Schmid $R^{\alpha g}$ par :

$$\tau^g = R^{\alpha g} : \sigma^{II} \quad \text{et} \quad \dot{\tau}^g = R^{\alpha g} : \dot{\sigma}^{II} \quad (11)$$

En combinant entre les relations (1)-(11), nous trouvons une nouvelle expression du taux de glissement :

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_c^g \\ \dot{\gamma}_w^g \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} K_c^h R^{ch} : \dot{\sigma}^{II} \\ K_w^h R^{wh} : \dot{\sigma}^{II} \end{pmatrix} \quad (12)$$

$$\text{avec : } \begin{bmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{gh} + K_c^g R_c^g : a^c : R_c^h & -K_c^g R_c^g : a^c : R_w^h \\ K_w^g R_w^g : a^w : R_c^h & \delta_{gh} - K_w^g R_w^g : a^w : R_w^h \end{bmatrix}^{-1}$$

δ_{gh} est le symbole de Kronecker. Ainsi, la loi de comportement mécanique des grains est sous la forme :

$$\dot{\epsilon}^{II} = \left[s + \sum_g (f R_c^g : T_c^g + (1-f) R_w^g : T_w^g) \right] : \dot{\sigma}^{II} = I^{-1} : \dot{\sigma}^{II} \quad (13)$$

Finalement, les modules élastoplastiques tangents mésoscopiques sont donnés par :

$$I^{-1} = \left[s + f R_c^g : T_c^g + (1-f) R_w^g : T_w^g \right] \quad (14)$$

Cette équation (14) nous permet donc d'avoir le comportement élastoplastique supposé local en moyenne au niveau du grain à partir des caractéristiques non locales au niveau des cellules et parois de dislocations.

2.2 Modèle Peeters

Dans cette partie, nous présentons une modélisation à l'échelle intragranulaire basée sur les travaux de Peeters et al. [4]. La description de la microstructure intragranulaire repose sur l'observation expérimentale de structures de dislocations particulières présentes dans des grains dont la structure cristalline est cubique centrée. Nous avons étendu ce modèle au cas des matériaux à symétrie cubique faces centrées.

Echelle microscopique

Le modèle développé ici est basé sur la décomposition de la densité de dislocations totale du matériau sous la forme de trois termes :

- La densité de dislocations immobiles stockées dans les murs de dislocations (cell-block boundaries (CBBs)), définie sur la famille de plans (111) : ρ^{wd} .
- La densité de dislocations mobile dites 'polarisées' définie sur la famille de plans (111) : ρ^{wp} .
- La densité de dislocations statistiquement stockées à l'intérieur des cellules (cell boundaries (CBs)), modélisée par un scalaire pour l'ensemble des systèmes de glissement : ρ .

La forme des lois décrivant l'évolution de ces trois grandeurs de dislocations est similaire aux lois classiques pour la gestion de stockage et d'annihilation de dislocations. Un matériau CFC est caractérisé par quatre

familles de murs de dislocations possibles. La normale de chaque mur est notée n_i^w ($i=1,\dots,4$) et la direction de glissement est notée m_s ($s=1,\dots,12$). A partir de la normale au mur et la direction de glissement, nous pouvons définir deux termes importants afin de calculer les densités de dislocations définies précédemment :

➤ Pour chaque mur actuellement généré pour un incrément de déformation donné, le flux de dislocations du réseau est décrit par l'expression :

$$\Phi_i = \sum_{s=1}^n \frac{\dot{\gamma}_s}{b} m_s \cdot n_i^w \quad (15)$$

$\dot{\gamma}_s$ est la vitesse du glissement du système s (positive ou négative) et b , la norme du vecteur de Burgers. Si un système de glissement est coplanaire au mur, alors il ne contribue pas au flux ϕ_i (le produit $m_s \cdot n_i^w$ est nul).

➤ Le taux de glissement total dans chaque mur :

$$\dot{\Gamma}_i = \sum_{\{s:m_s \cdot n_i^w = 0\}} |\dot{\gamma}_s| \quad (16)$$

Evolution de la densité de dislocations immobiles dans les murs actuellement générés:

L'évolution de la densité de dislocations immobiles de chaque famille i de murs au pas actuel est définie par :

$$\dot{\rho}_i^{wd} = \left(I^{wd} \sqrt{\rho_i^{wd}} - R^{wd} \rho_i^{wd} \right) \frac{\dot{\Gamma}_i}{b}, \quad (i=1,2) \quad (17)$$

I^{wd} et R^{wd} sont des coefficients de stockage et de restauration des dislocations.

Evolution de la densité de dislocations polarisées dans les murs actuellement générés :

Le stockage et l'annihilation des dislocations polaires de chaque famille i de murs au pas actuel sont décrits par :

$$\dot{\rho}_i^{wp} = \left(I^{wp} \sqrt{\rho_i^{wd} + |\rho_i^{wp}|} \text{sign}(\Phi_i) - R^{wp} \rho_i^{wp} \right) |\Phi_i| \quad (18)$$

I^{wp} : coefficient de stockage des dislocations polaires, R^{wp} : coefficient de restauration des dislocations polaires. Ce sont deux paramètres à identifier.

Evolution de la densité de dislocations dans les murs non générés actuellement :

Un changement de trajet de déformation ou une rotation du monocristal peut engendrer l'activation de nouveaux systèmes de glissement. Les dislocations mobiles vont alors générer de nouveaux murs de dislocations correspondant au mode actuel de déformation et détruire (de manière progressive) les murs formés lors de la déformation précédente. Les évolutions des densités de dislocations immobiles et polaires pour les anciens murs sont décrites par :

$$\dot{\rho}_i^{wd} = -\frac{R_{ncg}}{b} \rho_i^{wd} \dot{\Gamma}_{new} \quad \text{et} \quad \dot{\rho}_i^{wp} = -\frac{R_{ncg}}{b} \rho_i^{wp} \dot{\Gamma}_{new} \quad (19)$$

où $\dot{\Gamma}_{new}$ est la vitesse de glissement totale sur les plans de glissement actuellement activés et R_{ncg} , un terme de restauration des murs non générés pour l'incrément de déformation donné. Lorsque le flux associé au mur actuel est inversé (changement de signe), ce qui est le cas notamment lors d'un essai Bauschinger, les dislocations polarisées amassées le long de ces murs peuvent facilement se remettre en mouvement et être annihilées, ce qui peut se traduire par l'équation suivante :

$$\dot{\rho}_i^{wp} = -R_{rev} \rho_i^{wp} |\Phi_i| \quad (20)$$

où R_{rev} est la vitesse d'annihilation des dislocations polarisées.

Evolution de la densité de dislocations dans les cellules :

Durant un essai Bauschinger, la plupart des systèmes de glissement actifs lors de la pré-déformation le reste

durant le second trajet, mais dans le sens opposé. Les dislocations polarisées amassées le long des murs peuvent facilement se mouvoir et être annihilées par les dislocations de signe opposé dans les cellules, engendrant une augmentation de la vitesse d'annihilation des cellules de dislocations. L'évolution de la densité de dislocations dans les cellules est donnée par :

$$\dot{\rho} = \left\langle \left(I\sqrt{\rho} - R\rho \right) \sum_s |\dot{\gamma}^s| - \Psi R_2 \rho \frac{\rho_{\text{bausch}}}{\rho_{\text{sat}}^{\text{wp}}} \sum_s |\dot{\gamma}^s| \right\rangle \quad (21)$$

où I est un coefficient d'immobilisation et R un coefficient d'annihilation. Le symbole $\langle y \rangle$ donne 0 si $y \leq 0$ et y si $y > 0$. avec Ψ , un terme qui doit être déterminé suivant trois cas possibles : $\Psi=0$, si aucun flux n'est inversé, $\Psi=1$, si un flux de la famille i de murs est inversé : $\rho_{\text{bausch}} = |\rho_i^{\text{wp}}|$ et $\Psi=1$, si deux flux de la famille i

de murs sont inversés : $\rho_{\text{bausch}} = \sum_{i=1}^2 |\rho_i^{\text{wp}}|$. Le coefficient R_2 détermine l'importance de l'interaction des deux

familles de dislocations sur les cellules. Le coefficient $\rho_{\text{sat}}^{\text{wp}}$ est la valeur de saturation des dislocations polarisées. Nous renvoyons le lecteur aux articles de Peeters pour une explication détaillée de la justification physique de ces équations.

Echelle mésoscopique

La scission critique τ_c^s par un système de glissement s peut être définie en faisant intervenir la fraction volumique f des cellules, l'écroutissage isotrope dû aux cellules τ^{CB} , l'écroutissage latent et la polarité des murs τ^{CBB} et tous les aspects de la microstructure n'entrant pas en jeu dans les variables internes (tailles de grain, etc.) :

$$\tau_c^s = \tau_0 + (1-f)\tau^{\text{CB}} + f \sum_{i=1}^4 \tau_{\text{is}}^{\text{CBB}} \quad \text{et} \quad \tau_{\text{is}}^{\text{CBB}} = \tau_{\text{is}}^{\text{wp}} + \tau_{\text{is}}^{\text{wd}} \quad (22)$$

$$\text{avec : } \tau_{\text{is}}^{\text{wp}} = \alpha\mu b \left\langle \sqrt{|\rho_i^{\text{wp}}|} m_s \cdot n_i \cdot \text{sign}(\rho_i^{\text{wp}}) \right\rangle, \quad \tau_{\text{is}}^{\text{wd}} = \alpha\mu b \sqrt{|\rho_i^{\text{wd}}|} |m_s \cdot n_i| \quad \text{et} \quad \tau^{\text{CB}} = \alpha\mu b \sqrt{\rho} \quad (23)$$

La formulation de Ben-Zineb et al. [3] a été utilisée afin de gérer l'activation et la désactivation des systèmes de glissements :

$$\dot{\gamma}^g = K^g (\tau^g, \tau_c^g) \dot{\tau}^g \quad (24)$$

L'expression de la fonction K^g ressemble à la relation (5) adaptée à un milieu monophasé. On peut montrer que l'expression du taux de glissement est sous la forme :

$$\dot{\gamma}^h = \left(\delta_{\text{gh}} + K^g R^g : c : R^h \right)^{-1} K^g R^g : c : \dot{\epsilon}^{\text{II}} = N^{\text{hg}} : \dot{\epsilon}^{\text{II}} \quad (25)$$

Une fois le taux de glissement est déterminé, nous déduisons la loi de comportement mécanique du grain.

3 Modélisation du comportement du polycristal

Une autre transition vers l'échelle macroscopique permettra d'analyser l'influence des hétérogénéités intragranulaires sur le comportement global du matériau. Un schéma autocohérent classique est alors utilisé pour effectuer la transition depuis l'échelle mésoscopique (grain) jusqu'au niveau du polycristal (macroscopique). L'ajout principal est la loi de comportement mésoscopique résultant des propriétés non locales de la structure cellulaire permettant d'accéder aux grandeurs aux trois échelles du matériau.

4 Résultats numériques

Pour valider les modèles présentés dans ce travail, nous avons comparé nos simulations avec les résultats expérimentaux. La comparaison est basée sur le comportement mécanique global de l'aluminium 6060 (FIG. 1) et sur les déformations résiduelles (FIG. 2). Pour la détermination des paramètres des modèles nous avons utilisé les essais mécaniques en chargement monotone (traction et compression) comme essais de référence. Ensuite, pour les autres essais (chargements complexes et résultats de diffraction), le jeu de paramètres reste

évidemment identique. Les deux figures montrent clairement que les modèles arrivent à prédire d'une façon correcte les résultats expérimentaux aux différents échelles du matériau.

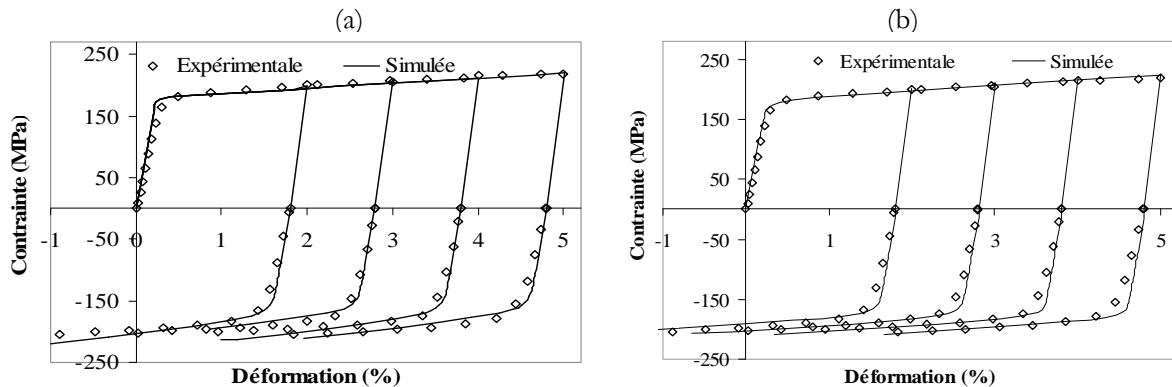


FIG. 1 – courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées (modèle Kr-SC) pour un trajet Bauschinger pour un polycristal Al6060 : (a) Kröner-Autocohérent, (b) Peeters-Autocohérent

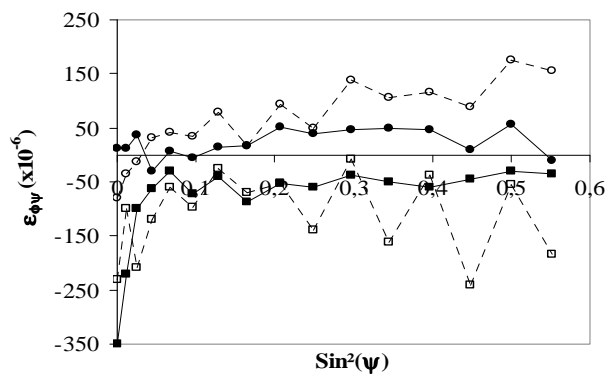


FIG. 2 – comparaison des courbes $\langle \epsilon_{\phi\psi}(hkl) \rangle_{vd} = f(\sin^2\psi)$ mesurées et calculées (modèle Kröner-autocohérent) dans la direction longitudinale ($\phi = 0^\circ$) après le premier chargement en traction pour un polycristal Al6060 : \square : 2 % de déformation – expérience ; \bullet : 2 % de déformation – simulation (plan (311)) ; \circ : 5 % de déformation – expérience ; \blacksquare : 5 % de déformation – simulation (plan (422))

5 Conclusion

Nous avons présenté deux modèles élastoplastiques pour des matériaux de structure cubique afin de tenir compte de l'hétérogénéité intragranulaire. Dans la première approche, nous avons utilisé une double transition d'échelles assurée par le modèle de Kröner pour déduire le comportement du grain de ceux des phases (cellules et parois) et par le modèle autocohérent afin de simuler le comportement du polycristal à partir de celui des grains. La deuxième approche est basée sur un couplage entre une modélisation de la microstructure de dislocations et une approche autocohérente. La modélisation de l'hétérogénéité intragranulaire consiste à alimenter le modèle autocohérent par une description microscopique des mécanismes des dislocations. Des confrontations avec des données expérimentales ont également été entreprises à l'échelle mésoscopique (déformation résiduelle) et à l'échelle macroscopique (comportement de polycristaux ayant subi des chargements monotones et séquentiels : effet Bauschinger) pour vérifier la cohérence des approches mises en place.

References

- [1] Berveiller M., Zaoui A., J. Mech. Phys. Solids, Vol. 26, pp. 325-344, 1979.
- [2] Ben Zineb T., Arbab Chirani S., Berveiller M., XV^{ème} Congrès Français de Mécanique, Nancy, 2001.
- [3] Muller D., Lemoine X., M. Berveiller M., J. Eng. Mat. Tech., Vol. 116, pp. 378-383, 1994.
- [4] Peeters B., Kalidindi S. R., Teodosiu C., Van Houtte P., Aernoudt E., J. Mech. Pys. Sol., Vol. 50, pp. 783-807, 2002.