



HAL
open science

Modélisation et simulation du comportement thermomécanique des aciers austénitiques à effet TWIP (TWinning Induced Plasticity)

Mohamad Najeeb Shiekhelsouk, Véronique Favier, Karim Inal, Mohamed Cherkaoui

► **To cite this version:**

Mohamad Najeeb Shiekhelsouk, Véronique Favier, Karim Inal, Mohamed Cherkaoui. Modélisation et simulation du comportement thermomécanique des aciers austénitiques à effet TWIP (TWinning Induced Plasticity). 17e Congrès Français de Mécanique, 2005, Troyes, France. pp.1-6. hal-04275411

HAL Id: hal-04275411

<https://hal.science/hal-04275411>

Submitted on 8 Nov 2023

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 et simulation du comportement thermomécanique des aciers austénitiques à effet TWIP (TWinning Induced Plasticity)

M. N. Shiekhelsouk (1, 2), V. Favier (2), K. Inal (2), M. Cherkaoui (1)

(1) Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux (LPMM), Université de Metz, 57000 Metz

Téléphone : 03 87 31 53 60, Télécopie : 03 87 31 53 66

(2) Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux, UMR CNRS 7554, ENSAM, 4 rue Augustin Fresnel, Technopôle, 57078 Metz Cedex 3

Téléphone : 03 87 37 54 30, Télécopie : 03 87 37 54 70

Résumé :

Un modèle micromécanique par transition d'échelle en élastoviscoplasticité a été développé pour décrire le comportement des aciers austénitiques à effet TWIP. Deux mécanismes de déformation sont considérés : le glissement cristallographique et le maillage. Des essais de traction uniaxiale à différentes températures ont été simulés et comparés à des résultats de la littérature.

Abstract :

A micromechanical model with scale transition method in elastoviscoplasticity has been developed to describe the behavior of the austenitic steels with TWIP effect. Two mechanisms of deformation are considered: crystallographic slip and twinning. Uniaxial tensile tests at various temperatures have been simulated and compared with results of the literature.

Mots clefs :

Elastoviscoplasticité ; plasticité cristalline ; maillage ; effet TWIP

1 Introduction

Un modèle micromécanique par transition d'échelle en élastoviscoplasticité et formulé en petites déformations est développé pour décrire le comportement des aciers austénitiques à effet TWIP (TWinning Induced Plasticity). Le modèle proposé est basé sur une description micromécanique et cristallographique des mécanismes physiques associés à la transformation par maillage et à la plasticité par glissement cristallographique. Dans le cas des structures Cubiques à Faces Centrées (CFC), 12 systèmes de maillage $\{111\}\langle -211 \rangle$ et 24 systèmes de glissement $\{111\}\langle 110 \rangle$ sont disponibles.

Dans cette première version, suivant les travaux de Kalidindi [6] et Allain *et al.* [9, 10], la fraction volumique de macles pour chaque système a été prise comme une variable interne décrivant l'évolution de la microstructure pendant le maillage. Pour le glissement, les variables internes utilisées sont les densités de dislocations stockées dans chaque système. La déformation plastique totale est la somme des contributions des systèmes de glissement et de maillage. Les interactions macle-macle et surtout les interactions entre les macles et le glissement, à l'origine de l'effet TWIP ont été considérées. Pour valider le modèle, deux essais de traction uniaxiale à deux températures ont été simulés et comparés à des résultats de la littérature dans le cas d'un acier 100% austénitique. Une version plus complète, prenant en compte l'effet de l'énergie de faute d'empilement sur la maillage, sera réalisée par la suite.

2 Simulation du comportement mécanique d'aciers 100 % austénitiques à effet TWIP

2.1 Modélisation micromécanique et physique

Les aciers étudiés sont des polycristaux de structure (CFC). Dans ce cas, les mécanismes de déformation considérés sont le glissement cristallographique et le maillage mécanique.

2.1.1 Déformation par glissement

Au niveau d'un grain monocristallin, la vitesse de déformation viscoplastique associé au glissement est donnée par :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp(\text{glissement})} = \sum R_{ij}^{(g)} \dot{\gamma}^{(g)} \quad (1)$$

où $R_{ij}^{(g)}$ est le tenseur de Schmidt associé au glissement, $\dot{\gamma}^{(g)}$ la vitesse de glissement qui est contrôlée par le mouvement thermiquement activé des dislocations qui doivent franchir les obstacles à courte distance tels que les atomes en solution solide et les interactions avec la forêt de dislocations. Dans une approche multi-systèmes, elle est donnée sur chaque système de glissement (g) par [1, 2, 3] :

$$\dot{\gamma}^{(g)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(g)}}{\mu} \right)^2 \exp \left(-\frac{\Delta G_0}{kT} \left(1 - \left(\frac{|\tau^{(g)}|}{\tau_r^{(g)}} \right)^p \right)^q \right) \text{sign}(\tau^{(g)}) \quad (2)$$

où $\dot{\gamma}_0$ est une vitesse de référence, τ est la cission résolue sur chaque système de glissement $\tau^{(g)} = R_{ij}^{(g)} \sigma_{ij}$, τ_r est une cission de référence décrivant l'état d'écrouissage, μ est le module de cisaillement, ΔG_0 est l'énergie d'activation lorsque $\tau = 0 \text{ MPa}$, p et q sont deux paramètres ajustables, k est la constante de Boltzmann et T la température absolue. Dans le cas des CFC, $p=q=1$ suivant Frost et Ashby [7].

Par conséquent, le tenseur de vitesse de déformation viscoplastique local peut s'écrire sous la forme :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp(\text{glissement})} = \frac{\dot{\gamma}_0}{\mu^2} \sum_g R_{ij}^{(g)} |\tau^{(g)}| \exp \left(-\frac{\Delta G_0}{kT} \left(1 - \frac{|\tau^{(g)}|}{\tau_r^{(g)}} \right) \right) R_{kl}^{(g)} \text{sign}(\tau^{(g)}) \sigma_{kl} = m_{ijkl}^{vp(\text{glissement})} \sigma_{kl} \quad (3)$$

où la complaisance viscoplastique associé au glissement est donnée par :

$$m_{ijkl}^{vp(\text{glissement})} = \frac{\dot{\gamma}_0}{\mu^2} \sum_g R_{ij}^{(g)} |\tau^{(g)}| \exp \left(-\frac{\Delta G_0}{kT} \left(1 - \frac{|\tau^{(g)}|}{\tau_r^{(g)}} \right) \right) R_{kl}^{(g)} \quad (4)$$

Dans une première approximation, la modélisation de l'écrouissage prend en compte la création et l'annihilation des dislocations. L'évolution de la densité totale de dislocations $\dot{\rho}^{(g)}$ du système de glissement (g) peut s'écrire :

$$\dot{\rho}^{(g)} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^{(g)}} - \beta \rho^{(g)} \right) |\dot{\gamma}^{(g)}| \quad (5)$$

où b est le vecteur de Burgers, β est une constante représentative du taux de restauration dynamique, $L^{(g)}$ est le libre parcours moyen des dislocation du système (g) qui dépend des différents obstacles rencontrés par ce système. Ces obstacles sont les joints de grain, la forêt de dislocations et les micromacles qui apparaissent avec la déformation. Ces dernières sont à l'origine d'un écrouissage supplémentaire permettant de retarder la perte de ductilité de ces aciers. Le libre parcours moyen est alors la moyenne harmonique des distances entre ces obstacles :

$$\frac{1}{L^{(g)}} = \frac{1}{D} + \frac{1}{T^{(g)}} + \frac{\sqrt{\sum_{i \neq g} \rho^i}}{k} \quad (6)$$

avec D la taille moyen de grain, k est un paramètre à ajuster, $T^{(g)}$ est l'espacement entre les micromacles sécantes au système de glissement (g).

L'observation microstructurale, qui a été faite par Allain *et al.* [9, 10], a confirmé que les micromacles ne sont pas espacées régulièrement dans les grains et regroupées en faisceaux. En considérant cette observation, nous avons utilisé une formulation suivant les travaux de Allain *et al.* [9] pour calculer $T^{(g)}$:

$$\frac{1}{T^{(g)}} = \frac{B^{gh} f^{(h)}}{2re(1 - \sum_{h=1}^{12} f^{(h)})} \quad (7)$$

avec r le nombre moyen de micromacles par faisceaux, e l'épaisseur de ces micromacles, $f^{(h)}$ la fraction volumique pour le système de maillage (h), B^{gh} est une matrice d'interaction entre systèmes de glissement et de maillage. Cette matrice est très importante pour révéler l'effet TWIP et définie de la manière suivante :

- $B^{gh} = 0$ si les systèmes de glissement (g) et de maillage (h) sont coplanaires.
- $B^{gh} = 1$ si les systèmes (g) et (h) sont sécants.

2.1.2 Déformation par maillage

Le maillage à l'échelle du grain peut être considéré comme un pseudo glissement caractérisé par son cisaillement γ^{tw} (70%) et son tenseur de Schmidt R^{tw} défini de la même manière que dans le cas de glissement [5]. De manière similaire au glissement, la vitesse de déformation viscoplastique associée au maillage est donnée par :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp(maillage)} = \sum_h R_{ij}^{tw(h)} \dot{\gamma}^{tw(h)} \quad (8)$$

où $\dot{\gamma}^{tw(h)}$ est la vitesse de cisaillement associée pour chaque système (h) de maillage. Elle est considérée homogène et définie par :

$$\dot{\gamma}^{tw(h)} = \dot{f}^{(h)} \gamma^{tw} \quad (9)$$

où $\dot{f}^{(h)}$ est l'évolution de la fraction volumique de macles du système (h). Dans un premier temps, pour décrire $\dot{f}^{(h)}$ dans le grain, nous avons utilisé une loi de type puissance suivant les travaux de Kalidindi [6] :

$$\dot{f}^{(h)} = \dot{f}^0 \left(\frac{\tau^{tw(h)}}{\tau_c^{tw(h)}} \right)^{1/m} \quad \text{si } \tau^{tw(h)} > 0 \quad (10)$$

$$\dot{f}^{(h)} = 0 \quad \text{si } \tau^{tw(h)} \leq 0$$

où \dot{f}^0 et m sont des paramètres à ajuster, $\tau^{tw(h)}$ la contrainte résolue du maillage qui est donnée par :

$$\tau^{tw(h)} = R_{ij}^{tw(h)} \sigma_{ij} \quad (11)$$

$\tau_c^{tw(h)}$ est une cission de référence du maillage qui décrit la résistance du matériau à la création de nouvelles macles. Pour décrire, l'évolution de cette cission de référence de maillage, nous avons utilisé une loi inspirée des travaux de Kalidindi [6].

$$\dot{\tau}_c^{tw(h)} = h_{nc}^{tw} \left(\sum_{h=1}^{N^{tw}} f^{(h)} \right)^\alpha \sum_{\substack{k \in \text{systèmes de maillages} \\ \text{non coplanaires avec } h}} \gamma^{tw} \dot{f}^{(k)} + h_{cp}^{tw} \left(\sum_{h=1}^{N^{tw}} f^{(h)} \right) \sum_{\substack{k \in \text{systèmes de maillages} \\ \text{coplanaires avec } h}} \gamma^{tw} \dot{f}^{(k)} \quad (12)$$

où N^{tw} est le nombre de systèmes de macles, $\sum_{h=1}^{N^{tw}} f^{(h)}$ est la fraction volumique totale de macles dans un grain, h_{nc}^{tw} , h_{cp}^{tw} sont des paramètres empirique. Le premier terme de la dernière équation représente l'écroûissage associé au maclage dû à la création de macles non coplanaires alors que le deuxième terme représente l'écroûissage associé au maclage dû à la production de macles coplanaires. En fait, le paramètre α est choisi proche de zéro pour que le taux d'écroûissage du premier terme augmente relativement lentement par rapport au second terme lorsque la déformation augmente. Par conséquent, on peut aussi réécrire le tenseur des vitesses de déformation viscoplastique associé au maclage sous la forme :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp(maclage)} = \sum_h R_{ij}^{tw(h)} \frac{\dot{f}^0}{\left| \tau^{tw(h)} \right| \left(\frac{\tau^{tw(h)}}{\tau_c} \right)^{1/m}} R_{kl}^{tw(h)} \sigma_{kl} = m_{ijkl}^{vp(maclage)} \sigma_{kl} \quad (13)$$

où la complaisance viscoplastique associée au maclage est donnée par :

$$m_{ijkl}^{vp(maclage)} = \sum_h R_{ij}^{tw(h)} \frac{\dot{f}^0}{\left| \tau^{tw(h)} \right| \left(\frac{\tau^{tw(h)}}{\tau_c} \right)^{1/m}} R_{kl}^{tw(h)} \quad (14)$$

En supposant que la déformation plastique dans la fraction maclée est négligeable, l'évolution de la vitesse de déformation viscoplastique totale pour un grain est la somme des contributions dues aux glissements dans la matrice (domaine non maclé) et dues aux macles :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp} = \left(1 - \sum_{h=1}^{N^{tw}} f^{(h)} \right) \dot{\epsilon}_{ij}^{vp(glissement)} + \sum_{h=1}^{N^{tw}} f^{(h)} \dot{\epsilon}_{ij}^{vp(maclage)} \quad (15)$$

D'après les relations (3) et (13), $\dot{\epsilon}_{ij}^{vp}$ peut encore s'écrire sous la forme :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp} = \left[\left(1 - \sum_{h=1}^{N^{tw}} f^{(h)} \right) m_{ijkl}^{vp(glissement)} + \sum_{h=1}^{N^{tw}} f^{(h)} m_{ijkl}^{vp(maclage)} \right] \sigma_{kl} = m_{ijkl}^{vp} \sigma_{kl} \quad (16)$$

où m_{ijkl}^{vp} le tenseur total des complaisances viscoplastiques.

Finalement, la loi de comportement du grain monocristallin représenté par un élément de Maxwell s'écrit :

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^{vp} = s_{ijkl} \dot{\sigma}_{kl} + m_{ijkl}^{vp} \sigma_{kl} \quad (17)$$

où $\dot{\epsilon}$, $\dot{\epsilon}^e$, $\dot{\epsilon}^{vp}$ sont les tenseurs des vitesses de déformation respectivement totale, élastique et viscoplastique, σ est le tenseur des contraintes, s est le tenseur de complaisance élastique.

Le comportement du polycristal est déterminé par une approche de type autocohérent à champs translats proposée récemment par Sabar *et al.* [4] pour des matériaux hétérogènes élastique-viscoplastiques et appliquée aux métaux polycristallins [1, 2].

3 Résultats et discussions

Des essais de traction uniaxiale, effectués sur un acier Fe-Mn pouvant présenter un effet TWIP, ont été calculés à l'aide du modèle à 298 K et 673 K. Ces simulations ont été comparées aux résultats expérimentaux de Allain *et al.* [9, 10]. Notons que les déformations atteintes ont été choisies élevées bien que le modèle soit formulé en petites déformations en première approximation. Une extension du modèle en grandes déformations est évidemment nécessaire et constituera une poursuite de ce travail.

Les paramètres de la loi de comportement du grain monocristallin liés au glissement ont été identifiés manuellement (tableau 1) à partir d'un essai expérimental obtenu en traction uniaxiale à température 673 K pour une vitesse de déformation 0.0007 s⁻¹ (figure 1). A cette température, l'énergie de faute d'empilement devient suffisamment élevée pour inhiber le maclage et donc le mécanisme de déformation prédominant est

le glissement. En revanche, à 298 K, température à laquelle l'énergie de faute d'empilement est faible, le maclage entre en compétition avec le glissement.

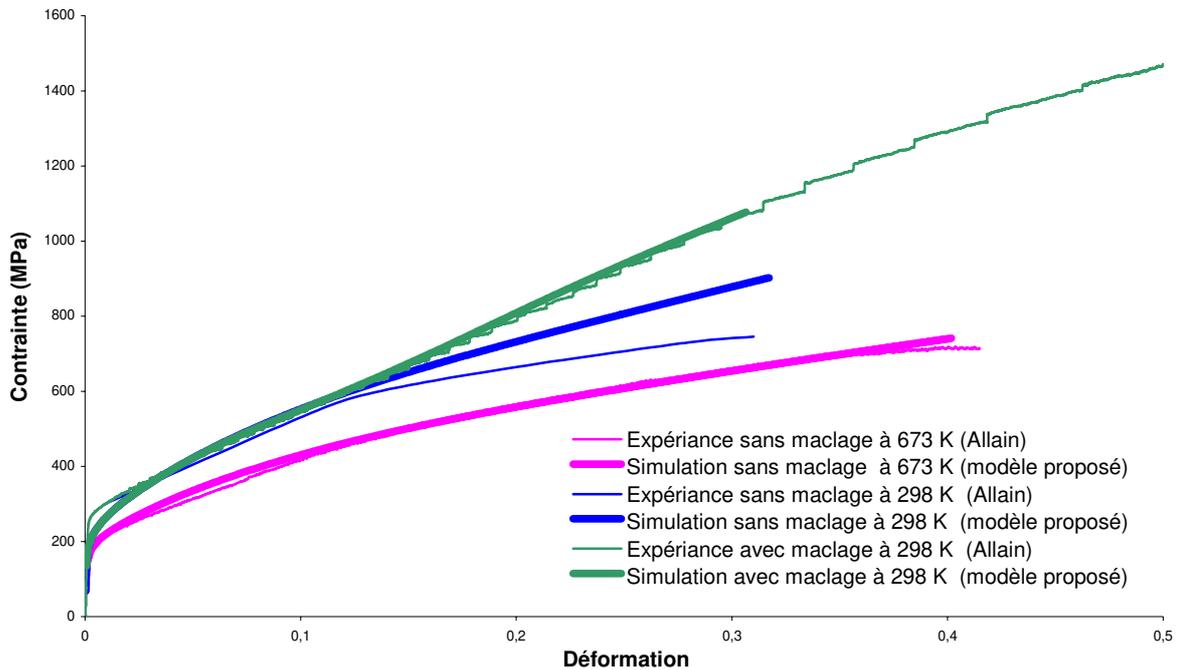


FIG. 1- Comportement d'un acier Fe-Mn à effet TWIP à deux températures : 298 K et 673 K. Comparaison entre les résultats issus du modèle proposé (traits gras) et les résultats expérimentaux issus de Allain et al [9,10] (traits fins)

En gardant identique les paramètres liés au glissement, nous avons ensuite identifié manuellement les paramètres liés au maclage (tableau 1) à partir d'un essai expérimental effectué à la température de 298 K issu des travaux de Allain et al [9, 10].

Le comportement du matériau à 298 K, en supposant que le maclage est inhibé, a été simulé. Le résultat obtenu a été comparé à celui simulé expérimentalement par des essais de prédéformation à 673 K réalisé par Allain *et al.* [9, 10]. A cette température, on peut remarquer qu'il y a une superposition des deux courbes à 298 K au-dessous de 15 % de déformation, et que l'écroûissage dû au maclage n'intervient qu'au-delà de 15 % de déformation résultat trouvé par Allain et *al.* [9, 10].

| Paramètres liés au glissement | | | | | | | Paramètres liés au maclage | | | | | | | |
|----------------------------------|----------------------|-----------------------|--------------------------|-----|---------|--------------------|----------------------------|----------|-----|---------|---------|-----------------------|------------------|-----|
| $\dot{\gamma}_0$ (s^{-1}) | ΔG_0 (eV) | $\tau_{r,0}$ (MPa) | ρ^0 (m^{-2}) | k | β | D (μm) | l (nm) | α | r | h_m^w | h_p^w | $\tau_{c,0}$ (MPa) | $\dot{\gamma}^0$ | m |
| 7.69E+4 | 1 | 90 | 10^{10} | 17 | 4E-9 | 15.6 | 30 | 0.05 | 5 | 80 | 800 | 80 | 7.8E-9 | 0.1 |

Tableau 1. Valeurs des principaux paramètres du modèle, identifiés à partir de résultats expérimentaux obtenus pour un acier austénitique sollicité en traction uniaxiale.

Nous avons tracé l'évolution de la fraction volumique totale du maclage avec la déformation imposée à 298 K en comparaison avec celle qui a été trouvée par Allain *et al.* [9, 10] (figure 2). On constate que la fraction volumique de macles reste faible (< 30 %) résultat également trouvé par le modèle de Allain. Cette faible valeur est cohérente avec les observations microscopiques qui montrent, dans le cas des aciers austénitiques, que les macles se présentent en réalité sous la forme de paquets de micro macles [9, 10].

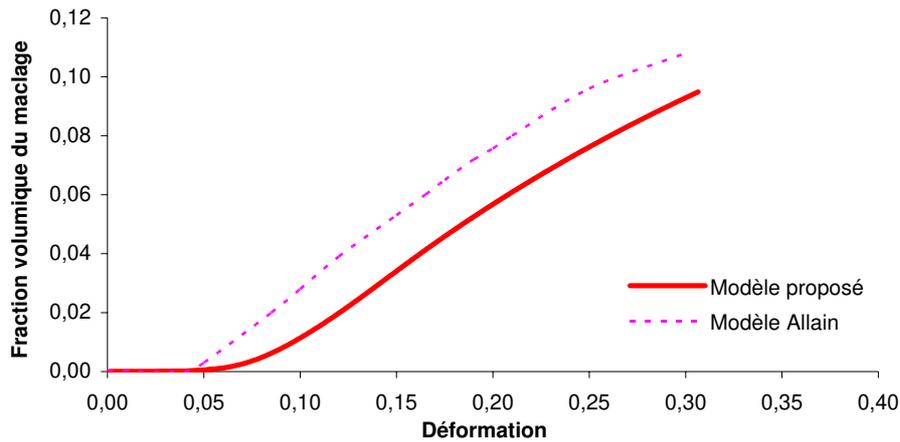


FIG. 2- Evolution de la fraction volumique totale des macles en fonction de la déformation

4 Conclusion

Les bases d'un modèle micromécanique à transition d'échelle en élastoviscoplasticité ont été posées pour décrire le comportement d'un acier austénitique à effet TWIP. Le comportement du grain monocristallin prend en compte la déformation par glissement et par maillage et l'écroissage supplémentaire dû à l'affinement de la microstructure par maillage. En particulier, les interactions maillage/glissement, à la base de l'effet TWIP, ont été prises en compte au travers la réduction du libre parcours moyen des dislocations dû à un affinement de la microstructure et conduisant ainsi à un écroissage supplémentaire. Dans la suite du travail, les améliorations du modèle porteront sur l'introduction de l'effet de l'énergie de faute d'empilement sur le maillage.

Remerciement : Nous remercions très sincèrement ARCELOR RESEARCH pour leur soutien et plus particulièrement Sébastien Allain et Olivier Bouaziz pour les discussions scientifiques.

Références

- [1] Berbenni, S., Elastoviscoplasticité des aciers polycristallins : Modélisation micromécanique et physique – Applications au comportement dynamique et à l'effet Bake-Hardening, Thèse de Doctorat de l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers- Centre de Metz (2002).
- [2] Berbenni, S., Favier, V., Lemoine, X., Berveiller, M., Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures, *Mat. Sci. Eng. A.* 372, (2004), pp. 128-136.
- [3] Kocks, U.F., Argon, A.S. and Ashby, M.F., *Thermodynamics and Kinetics of Slip*, Oxford, Pergamon Press (1975).
- [4] Sabar, H. Berveiller, M., Favier, V., Berbenni, S., A new class of micro-macro models for elastic-viscoplastic heterogeneous materials, *Int. J. Solids Struct.*, 39 (2002), pp. 3257-3276.
- [5] M. Cherkaoui, Constitutive equations for twinning and slip in low stacking fault energy metals : a crystal plasticity-type model for moderate strains. *Philosophical Magazine*, (2003), V 83, P.3945-3958.
- [6] S.R. Kalidindi, Modeling anisotropic strain hardening and deformation textures in low stacking fault energy fcc metals, *Int. J. of Plasticity*, 17, (2001), pp. 837-860.
- [7] Harold J Frost, Michael F Ashby, *Deformation-Mechanism Maps, The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics*, site web http://thayer.dartmouth.edu/~defmech/table_of_contents.htm.
- [8] Remy, L., *Acta Met.* 26 (1978), p. 443/51.
- [9] S. Allain, J. -P. Chateau and O. Bouaziz, A physical model of the twinning-induced plasticity effect in a high manganese austenitic steel, *Materials Science and Engineering A*, Volumes 387-389, 15 December 2004, Pages 143-147.
- [10] S. Allain, J. -P. Chateau, D. Dahmoun and O. Bouaziz, Modeling of mechanical twinning in a high manganese content austenitic steel, *Materials Science and Engineering A*, Volumes 387-389, 15 December 2004, Pages 272-276.