

SIMULATION PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS DU COMPORTEMENT MÉCANIQUE LOCAL DES POLYCRISTAUX. COUPLAGES PHYSIQUES

Colette Rey, Olivier Fandeur

▶ **To cite this version:**

Colette Rey, Olivier Fandeur. SIMULATION PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS DU COMPORTEMENT MÉCANIQUE LOCAL DES POLYCRISTAUX. COUPLAGES PHYSIQUES. ECP SCIENCE. Rayonnement synchrotron rayons X et Neutrons au Service des Matériaux, ECP Scciences, pp.410-448, 2013, Physique/Matériaux. hal-00788583

HAL Id: hal-00788583

https://centralesupelec.hal.science/hal-00788583

Submitted on 14 Feb 2013

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.

A paraître dans le livre Texture-Contraintes Résiduelles (2010)
Ed : C. Lodini et T. Baudin

SIMULATION PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS DU COMPORTEMENT MÉCANIQUE LOCAL DES POLYCRISTAUX. COUPLAGES PHYSIQUES

Colette Rey[1], Olivier Fandeur[2]

1) Laboratoire Mécanique des Sols Structures et Matériaux, UMR 8579, École Centrale Paris, F-92295 Châtenay-Malabry, France.
2) CEA, DEN, DM2S, SEMT, LM2S, F-91191 Gif-sur-Yvette, France.

1 INTRODUCTION

L'utilisation de la méthode des Éléments Finis pour prédire le comportement local des matériaux cristallins à partir des champs mécaniques locaux, s'est développée en 1980 avec les travaux de Peirce *et al.* [1]. Cette approche s'est généralisée du fait de l'augmentation de la puissance de calcul, qui permet actuellement de traiter des agrégats cristallins représentatifs de matériaux comportant plusieurs centaines de grains ou phases [2]. L'intérêt des approches multicristallines est de décrire au mieux les interactions entre grains et les effets des joints de grains. Cela suppose une bonne description spatiale de la morphologie de chaque grain et de leur orientation cristallographique.

Les approches cristallines couplées à la méthode des Éléments Finis prennent en compte la plasticité à l'échelle des systèmes de glissement dans les grains dont l'orientation est connue. Elles s'appuient sur des lois de comportement et d'écrouissage et permettent de décrire les hétérogénéités de champs mécaniques locaux et leur influence sur la mise en forme, les textures de déformation et de recristallisation, l'endommagement et la rupture. La performance de ces modèles est liée aux lois physiques choisies, mais aussi à la représentativité de l'agrégat cristallin, au choix du maillage et aux conditions aux limites appliquées. L'utilisation de ces approches dans des logiciels de calcul du commerce nécessite l'écriture de sous-programmes du comportement correspondant aux lois retenues.

2 AGRÉGATS CRISTALLINS, CONDITIONS AUX LIMITES ET MAILLAGE

2.1 OBTENTION DES AGRÉGATS

Trois types d'agrégats sont en général utilisés :

- Des agrégats générés automatiquement auxquels on attribue, aléatoirement, les propriétés locales telles que la texture globale et la taille de grain moyenne [3], [4].
- Des agrégats formés d'une couche de grains caractérisée par EBSD, puis extrudée numériquement, qui permettent une première étude du problème [5], [6].
- Des agrégats représentatifs du matériau étudié.

Les méthodes expérimentales permettent maintenant de construire des agrégats représentatifs du matériau avec les orientations des grains, leur morphologie et leur répartition spatiale. Ce sont :

- La tomographie 3DXRD utilisant les rayonnements d'un synchrotron, afin de déterminer la morphologie de mousses ou pour détecter les fissures. Ces méthodes permettent également des études du suivi de la déformation et de la recristallisation sur

quelques grains. La résolution actuelle de cette approche n'autorise cependant l'étude que de quelques grains dont la taille est de quelques centaines de microns.

- La micro-tomographie en contrastes d'absorption et de phase permettant la détermination structurale tridimensionnelle à une échelle sub-micrométrique.
- L'utilisation d'un faisceau d'ions focalisé (FIB) couplé à l'EBSD qui permet, par décapages successifs et analyse des couches, de reconstruire numériquement l'agrégat. Un exemple de matériau biphasé Mo-30 %Ti est donné sur la figure 1 [7].

Cette dernière méthode est appelée à remplacer les constructions manuelles, longues et fastidieuses, d'agrégats obtenues par polissages successifs avec détermination de l'orientation de chaque couche de grains [8].

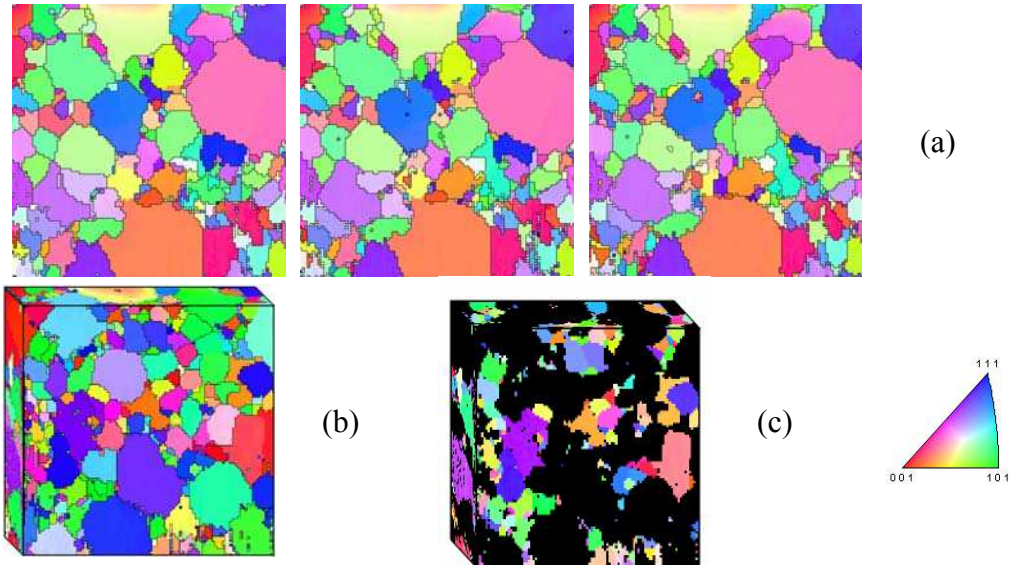


Fig. 1. *Exemple d'agrégat tridimensionnel Mo-30 %TiC obtenu par FIB (Max Planck Institute, Düsseldorf) : (a) exemple de quelques couches obtenues, (b) reconstruction de l'agrégat, (c) reconstruction de la seule phase TiC.*

Le problème de la représentativité des agrégats reste encore un problème ouvert. En effet, les agrégats pour être représentatifs du matériau doivent être égaux au moins à un, voire plusieurs VER (volume élémentaire représentatif) et donc répondre à différentes exigences. Avant déformation, le VER doit traduire la morphologie de grains, les textures globale et locale du matériau d'origine et la répartition spatiale des grains. Les phénomènes de percolation pour les matériaux multiphasés sont aussi à prendre en compte. Les méthodes d'obtention des agrégats étant encore limitées, les agrégats peuvent ne pas être parfaitement représentatifs d'un matériau.

2.2 MAILLAGE ET CONDITIONS AUX LIMITES

Le maillage des grains des agrégats est extrêmement important. En général, un maillage fin est nécessaire, à la fois, pour obtenir une convergence correcte des calculs et une description fine des champs mécaniques.
La méthode générale consiste à mailler un agrégat puis à affecter à chaque point de Gauss :

- les propriétés microstructurales de l'état initial (orientations cristallines, densités de dislocations, systèmes de glissement…),
- une loi de comportement,

- une loi d'écrouissage.

Les propriétés d'un élément dans un grain sont initialement identiques, puis évoluent au cours de la déformation, en relation avec les grains voisins.
Les conditions aux limites peuvent correspondre au chargement appliqué à l'éprouvette ou, mieux, à l'état de contrainte de l'agrégat dans la structure. Un exemple est donné à la figure 2. Pour déterminer les champs mécaniques locaux en fond de fissure, il faut que l'agrégat soit soumis à des conditions aux limites proches de celles existantes dans la région choisie de la structure. Une méthode simple consiste à calculer les champs mécaniques dans la structure pour un comportement matériau macroscopique. Les déplacements calculés sont relevés autour de la zone correspondant à l'agrégat.

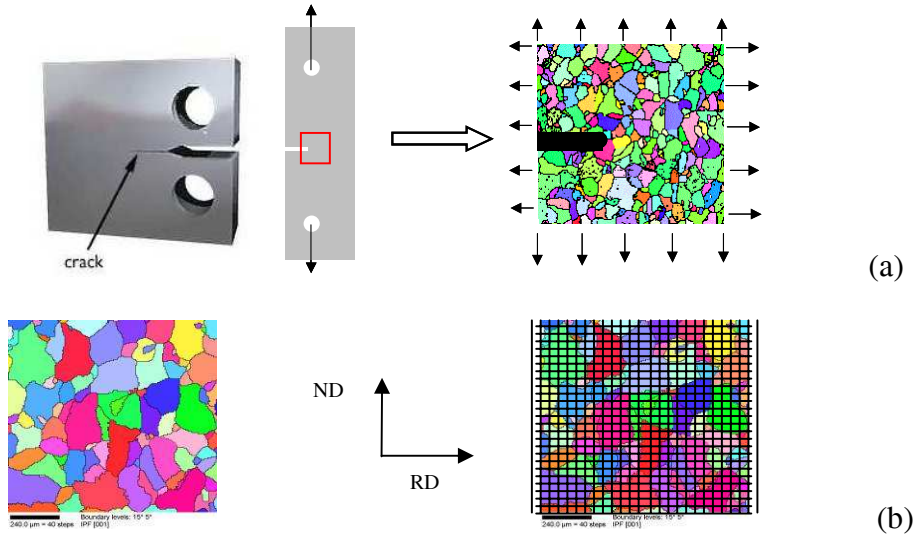


Fig. 2. *(a) Conditions aux limites sur un agrégat en fond de fissure déterminées à partir d'un calcul de structure. (b) Agrégat déterminé par EBSD et maillage correspondant.*

3 MODÈLES CRISTALLINS

Il existe plusieurs modèles plus ou moins phénoménologiques, tous utilisant une représentation du glissement plastique sur les systèmes de glissement, mais variant quant à la description de l'écrouissage du matériau et des lois de comportement. La plupart des modèles de plasticité cristalline sont développés dans le cadre de la mécanique des milieux continus et, plus précisément, dans le cadre des grandes transformations afin de prendre en compte la rotation du réseau cristallin au sein des grains.
On peut distinguer deux descriptions : la première transposant aux systèmes de glissement les modèles de plasticité à l'échelle macroscopique et la seconde s'appuyant sur la théorie des dislocations en utilisant des densités de dislocations moyennes sur les systèmes de glissement afin de travailler à l'échelle d'un milieu continu.

3.1 MODÉLISATION DU TYPE FORÊT AVEC ÉCROUISSAGE ISOTROPE, $T > T_F/3$

Nous présentons les différentes classes de modèles décrivant les mécanismes élémentaires de la plasticité dans les métaux de structure cubique centrée (CC). Ces modèles se situent en général à l'échelle de la dislocation. L'écrouissage de type forêt correspond à l'interaction des dislocations mobiles avec les dislocations qui percent leur plan de glissement. Ce type d'écrouissage est valable dans un intervalle de température qui dépend du matériau.

3.1.1 Lois d'écoulement

Les notions de plasticité cristalline ont été données dans le chapitre précédent (K. Wierzbanowski).

Écoulement plastique : Dans une gamme de température et de vitesse de sollicitation où l'écoulement plastique obéit au critère de Schmid, il y a écoulement plastique dès que la cission résolue sur l'un des systèmes de glissement *(s)* atteint une valeur critique :

$$\left|\tau^s\right| \geq \tau_c^s \tag{1}$$

$$\text{avec} \quad \left|\dot{\tau}^s\right| = \dot{\tau}_c^s \tag{2}$$

La relation (2) est justifiée par le fait qu'il est nécessaire que $\left|\tau^s\right|$ demeure égale à τ_c^s suffisamment longtemps pour que le système de glissement *(s)* soit activé.

Écoulement viscoplastique : Les lois d'écoulement viscoplastiques les plus communes sont basées sur la théorie du glissement activé. Elles concernent les matériaux de structure CFC et CC au-dessus de la température de transition où la déformation s'effectue par émission de boucles de dislocations. La loi d'écoulement pour un système de glissement *(s)* est alors décrite par la relation :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{k.T}\right)\left(\frac{\tau^s}{\tau_\mu^s}\right)^{\frac{\tau_\mu^s V^*}{k.T}} \tag{3}$$

ou, de manière plus compacte,
$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \left(\frac{\tau^s}{\tau_\mu^s}\right)^n \tag{4}$$

Avec

ρ_m^s	densité de dislocations mobiles,
b	vecteur de Burgers,
v_D	fréquence de Debye,
ΔG_0	énergie d'activation relative au franchissement des obstacles,
k , T	constante de Boltzmann et température (absolue),
τ^s , τ_μ^s	cission résolue et contrainte athermique,
V^*	volume d'activation,
$n = \frac{\tau_\mu^s V^*}{k.T}$	coefficient inverse de la sensibilité à la vitesse,

$\dot{\gamma}_0^s = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{k.T}\right)$.

Cette loi viscoplastique n'est valable qu'au-dessus de la température de transition de comportement. En dessous de cette température, les mécanismes de déformation plastique ne sont pas de même nature et une autre modélisation doit être proposée.

3.1.2 Lois d'écrouissage

Il existe deux types d'approches dans la modélisation de l'écrouissage : les modèles phénoménologiques et les modèles intégrant les densités de dislocations comme variables internes.

Les modèles phénoménologiques sont presque tous basés sur la théorie de la microplasticité de Taylor [9]. Cette théorie relie l'incrément de cission critique nécessaire pour activer le glissement sur un système *(s)* au glissement cumulé sur tous les systèmes.
La cission critique s'écrit alors :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su} \dot{\gamma}^u \tag{5}$$

Dans une première approche, les termes de la matrice d'écrouissage h^{su} restent constants au cours de la déformation. On distingue les termes diagonaux de cette matrice h^{ss} (auto-écrouissage) des termes non diagonaux h^{su}, s ≠ u (écrouissage latent). D'autres modèles, plus élaborés, améliorent cette description de l'écrouissage, notamment en introduisant une non linéarité des termes de la matrice d'écrouissage.

Modèle de Kocks [10] : Ce modèle est basé sur celui de Taylor mais il introduit une non linéarité de la matrice *h* en fonction de la déformation. Ici, tous les termes de la matrice d'écrouissage sont identiques et égaux à une fonction h_0 définie par :

$$h^{su} = h_0 = H_0 \left(\frac{\tau_{sat} - \tau_c}{\tau_{sat} - \tau_0} \right) \tag{6}$$

τ_0 est la cission critique initiale d'activation, considérée identique pour tous les systèmes, H_0 le module d'écrouissage initial et τ_{sat} la cission à saturation de l'écrouissage, qui est reliée au glissement sur chacun des systèmes par la relation :

$$\tau_{sat} = \tau_{sat}^0 \left(\frac{\sum_s \dot{\gamma}^s}{\dot{\gamma}^0} \right)^m \tag{7}$$

τ_{sat}^0 , $\dot{\gamma}^0$ et *m* étant des paramètres du matériau.

Modèle de Peirce, Asaro et Needleman [1] : Ce modèle est aussi fondé sur une description non linéaire de la matrice *h*. Comme dans le modèle de Taylor, on distingue les termes d'auto-écrouissage et d'écrouissage latent, où l'écrouissage est ici fonction du glissement cumulé γ sur tous les systèmes actifs.

$$h^{su} = q\,h(\gamma) + (1-q)\,h(\gamma)\delta^{su} \tag{8}$$

Avec

$$h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{h_0 \gamma}{\left|\tau^s\right| - \tau_0}\right) \tag{9}$$

Dans les équations définissant l'expression de h, h_0 correspond à la valeur initiale h, et τ_0 la cission résolue critique initiale. Quant au paramètre q, il caractérise l'importance de l'écrouissage latent par rapport à l'auto-écrouissage. Les valeurs de q pour ce modèle sont généralement comprises entre 1 et 1,4, ce qui implique une prépondérance de l'écrouissage latent. Cependant, les travaux de Madec *et al.* [11] remettent en cause l'importance relative des deux termes.

Exemple d'autres modèles : Le modèle de Bhattacharyya *et al*. [12] reprend la même description, mais l'évolution de la matrice h est alors décrite par une fonction puissance :

$$h^{su} = h_0\left(1 - \frac{\tau_c^s}{\tau_\alpha}\right)^a \tag{10}$$

h_0 correspond toujours à la valeur initiale des termes de la matrice h. Par contre, le terme τ_α n'a pas de signification physique bien précise.

3.1.3 Modèles d'écrouissage intégrant ρ comme variable interne

Les modèles phénoménologiques décrivent l'écrouissage comme étant une fonction du glissement cumulé mais il est aussi possible de décrire l'écrouissage à partir d'autres variables telles que les densités de dislocations sur les différents systèmes de glissement. Nous allons donc nous intéresser de façon plus détaillée à cette approche car elle constitue la base théorique de l'outil de simulation d'un agrégat de grains utilisé dans cette étude.

Modèle de Mecking et Kocks [13] : Ce modèle est l'un des premiers à avoir introduit une densité de dislocations comme variable d'écrouissage. Il utilise la relation empirique liant la densité de dislocations totale ρ et la contrainte d'écoulement σ_c :

$$\sigma_c = \sigma_0 + M\alpha\mu b\sqrt{\rho} \tag{11}$$

Avec

- σ_0 constante prenant en compte la friction de réseau (forces de Peierls),
- M facteur de Taylor moyen,
- α paramètre du matériau entre 0,1 et 0,5 suivant le type d'interaction entre dislocations,
- μ module de cisaillement,
- b norme du vecteur de Burgers.

Le modèle de Kocks intègre également une équation différentielle régissant l'évolution de la densité de dislocations ρ en fonction de la déformation plastique équivalente ε_{eq}^p :

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon_{eq}^p} = M\left(k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho\right) \tag{12}$$

k_1 et k_2 constituent deux paramètres liés au matériau. Le terme $k_1\sqrt{\rho}$ correspond à la création de dislocations, tandis que le terme $k_2\rho$ est lié à l'annihilation des dislocations. Ce modèle permet de prendre en compte l'interaction entre dislocations mobiles et immobiles, ainsi que l'effet de saturation de l'écrouissage au fur et à mesure de la déformation plastique.

Modèle de Teodosiu, Raphanel et Tabourot [14, 15] : Ce modèle repose sur les hypothèses du modèle de Kocks. La différence provient de l'introduction dans le modèle des densités de dislocations et des cissions critiques sur chacun des systèmes de glissement.
La cission critique d'activation sur un système donné dépend de la densité de dislocations sur chacun des systèmes de glissement activés. La cission critique τ_c^s s'écrit :

$$\tau_c^s = \tau_c^0 + \mu b\sqrt{\sum_u a^{su}\rho^u} \tag{13}$$

La matrice a^{su}, introduite par Franciosi [16], définit l'interaction entre les différentes familles de systèmes de glissement *(s)* et *(u)*.
Afin de décrire l'évolution de la densité de dislocations ρ^s sur chaque système de glissement *(s)*, on doit distinguer les dislocations mobiles et immobiles :

$$\rho^s = \rho_m^s + \rho_i^s \tag{14}$$

Les équations différentielles décrivant l'évolution de la densité de dislocations mobiles et immobiles font intervenir plusieurs contributions : la production r_p^s, l'annihilation r_{ma}^s des dislocations mobiles, l'immobilisation r_i^s et l'annihilation r_{ia}^s des dislocations immobiles.

$$\dot{\rho}_m^s = r_p^s - r_{ma}^s - r_i^s \qquad \text{et} \qquad \dot{\rho}_i^s = r_i^s - r_{ia}^s \tag{15}$$

La densité de dislocations immobilisée s'écrit :

$$r_i^s = \frac{\left|\dot{\gamma}^s\right|}{b\Lambda^s} \tag{16}$$

Λ^s est le libre parcours moyen, c'est-à-dire la distance parcourue en moyenne par une dislocation avant d'être immobilisée. Il est relié à la densité de dislocations perçant le plan de glissement par la relation suivante, K désignant le nombre d'obstacles franchis par les dislocations :

$$\Lambda^s = \frac{K}{\sqrt{\sum_{u\neq s}\rho^u}} \tag{17}$$

Essman et Mughrabi [17] ont proposé une loi pour décrire le taux d'annihilation des dislocations immobiles :

$$r_{ia}^s = 2\frac{y_c}{b}\rho_i^s\left|\dot{\gamma}^s\right| \tag{18}$$

La densité de dislocations mobiles évoluant peu ($\dot{\rho}_m^s \approx 0$), on néglige par la suite cette densité. En combinant les équations (16), (17), et (18), puis en considérant que $\rho^s \approx \rho_i^s$, on obtient [15] :

$$\dot{\rho}^s = \frac{\left|\dot{\gamma}^s\right|}{b}\left(\frac{\sqrt{\sum_{u\neq s}\rho^u}}{K} - 2y_c\rho^s\right) \tag{19}$$

On peut alors en déduire l'expression de la matrice d'écrouissage h^{su} à partir de la relation :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su}\left|\dot{\gamma}^u\right| \tag{20}$$

$$h^{su} = \frac{\mu a^{su}}{2}\frac{1}{\sqrt{\sum_t a^{st}\rho^t}}\left(\frac{\sqrt{\sum_{t\neq s}\rho^t}}{K} - 2y_c\rho^u\right) \tag{21}$$

Cette matrice étant fortement non linéaire, elle ne reste pas *a priori* symétrique au cours de la déformation et l'écrouissage n'est plus isotrope. Ce modèle, à l'inverse de celui de Kocks, prévoit correctement les trois stades d'écrouissage du monocristal. L'intérêt majeur de la loi d'écrouissage proposée ici réside dans la possibilité d'étendre son identification à un large domaine de déformations (prise en compte de l'anisotropie due à la déformation) et de températures. Ce modèle ne décrit pas les sous-structures de dislocations acquises avec la déformation et donc décrit mal le stade IV.

3.2 MODÈLES DU TYPE FORÊT AVEC ÉCROUISSAGE CINÉMATIQUE, $T > 0{,}3.T_F$

Ces approches sont utilisées pour décrire le comportement des matériaux en fatigue.

Mughrabi [18] puis Feaugas [19] ont modélisé les contraintes internes à longue distance provenant des dislocations stockées dans les grains sous forme d'empilements, contre un obstacle (joint de grains, etc.) ou dans des parois de dislocations. Ces parois font que le matériau peut être considéré comme un composite constitué d'une fraction f_w de phase dure caractérisée par la contrainte τ_w et d'une phase molle f_c dont la contrainte est τ_c.
La cission appliquée s'écrit sous la forme d'une loi des mélanges :

$$\tau = f_w\tau_w + f_c\tau_c \tag{22}$$

avec

$$\tau_w = \alpha\mu b\sqrt{\rho_w} \tag{23}$$

$$\tau_c = \alpha\mu b\sqrt{\rho_c}$$

Ou encore

$$\tau = \alpha\mu b\sqrt{\rho_c} + \alpha\mu b f_w\left[\sqrt{\rho_w} - \sqrt{\rho_c}\right] \tag{24}$$

Les dislocations qui accommodent les incompatibilités de déformation plastique sont décrites sous le nom de dislocations géométriquement nécessaires. Une fraction de ces dislocations est activée lors de la décharge :

$$\rho_G = \frac{2\alpha}{\Gamma}\left(\sqrt{\rho_w} - \sqrt{\rho_C}\right) \tag{25}$$

Des lois d'évolution prenant en compte les dislocations stockées temporairement ont été proposées récemment par Saai [20] pour décrire l'écrouissage cinématique à partir des

densités de dislocations. D'après Saai [20], la loi viscoplastique pour le système de glissement (s) s'écrit :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left[\frac{\tau^s - \tau^s_{cin}}{\tau^s_\mu} \right]^{\frac{1}{m}} \tag{26}$$

avec

$$\tau^s_\mu = \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \tag{27}$$

$$\tau_{cin} = \frac{\mu b}{4(1-\nu)} \lambda^s \rho^s_{ts}$$

où ρ_{ts} est la densité de dislocations stockée temporairement qui intervient lors de la décharge, ρ_{ds} la densité de dislocations stockée définitivement, $\rho^s = \rho^s_{ds} + \rho^s_{ts}$ la densité de dislocations totale.
Les lois d'évolution des densités de dislocations ρ_{ts} et ρ_{ds} comprennent un terme source et un terme d'annihilation (équation 19), mais font intervenir deux paramètres du matériau K_{mur} et K_{canal}, représentant le nombre d'obstacles franchis par les dislocations dans les parois et les canaux. Il est admis que $K_{mur} = \beta K_{canal}$ avec $\beta < 1$. Les lois dépendent de la force de l'obstacle au glissement qui, dans ce modèle, est la hauteur du dipôle h_d.

Le modèle introduit par Cailletaud [21] et très largement utilisé consiste à transposer à l'échelle microscopique les modèles usuels d'écrouissage en macroplasticité [22]. Deux variables d'écrouissage cinématique x^s et isotrope r^s sont ainsi définies :

$$x^s = C\alpha^s \tag{28}$$

avec

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\left|\dot{\gamma}^s\right|\alpha^s \tag{29}$$

$$r^s = r_0 + q\sum_u H^{su}\left(1 - \exp\left(-b\int_0^t \left|\dot{\gamma}^u\right|.dt\right)\right) \tag{30}$$

Les paramètres *C*, r_0 et *d* sont des constantes à déterminer.
La matrice d'écrouissage H^{su} introduite par Mandel [23] est définie par :

$$H^{su} = h_2 + (h_1 - h_2)\delta_{su} \tag{31}$$

où h_1 et h_2 désignent deux coefficients du matériau.

La loi d'écoulement est alors décrite de la manière suivante :

$$\text{si } \left|\tau^s - r^s\right| \geq \tau^s_c \text{, alors } \quad \dot{\gamma}^s = \left(\frac{\left|\tau^s - x^s\right| - r^s}{K} \right)^m \text{sign}(\tau^s - x^s) \text{, sinon } \dot{\gamma}^s = 0 \tag{32}$$

3.3 MODÈLES CRISTALLINS BASSE TEMPÉRATURE, ÉCROUISSAGE ISOTROPE, T < TF/3

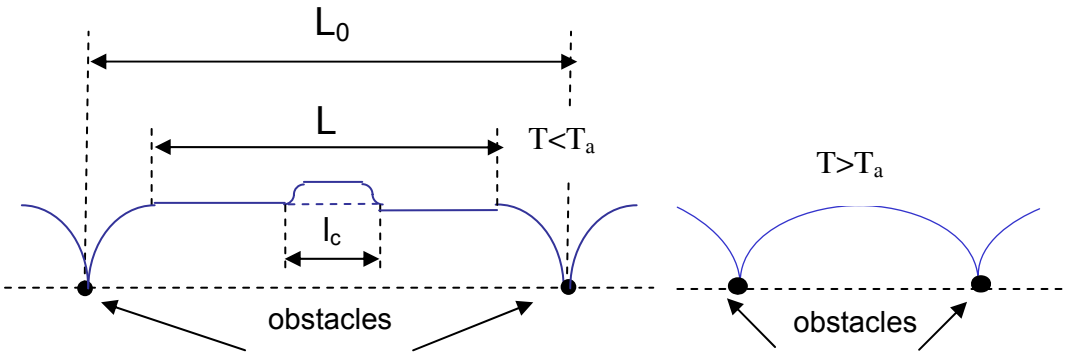
3.3.1 Lois d'écoulement activées thermiquement

La loi de type viscoplastique présentée dans le paragraphe précédent constitue en fait un cas particulier des lois basées sur le mouvement thermiquement activé des dislocations avec un écrouissage du type forêt. Dans les métaux de structure CC et en dessous de la température de transition de comportement plastique, la plasticité est gouvernée par le franchissement des vallées de Peierls, via le mécanisme de double décrochement qui est lui-même activé thermiquement.
La fréquence ν_s de formation d'un double décrochement de longueur caractéristique l_c le long d'un segment vis de longueur L (figure 3) est donnée par la théorie de l'activation thermique proposée par Kroupa [25] et Friedel [24] :

$$\nu_s = \nu_D \frac{b}{l_c}\frac{L}{l_c}\exp\left[-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{kT}\right] \tag{33}$$

Le terme $\Delta G(\tau_{eff})$ désigne l'énergie d'activation correspondant à la hauteur de la barrière énergétique constituée par les vallées de Peierls. Cette énergie dépend de la cission effective τ_{eff} définie comme étant la cission appliquée τ à laquelle on retranche sa composante athermique τ_μ :

$$\tau_{eff} = \tau - \tau_\mu \tag{34}$$



$T < T_a$: plasticité contrôlée par la mobilité des dislocations vis
$T > T_a$: plasticité contrôlée par les obstacles formées par les dislocations
T_a : température de transition

Fig. 3. *Spécificités du comportement plastique à hautes et basses températures dans les CC.*

La nucléation d'un double décrochement est suivie d'une propagation quasi-instantanée de celui-ci le long du segment vis par un effet de tension de ligne. Par conséquent, dès lors qu'un double décrochement a été généré, il y a avancée de l'ensemble du segment vis à la vitesse $v_s = b\nu_s$. Louchet *et al.* [26] a montré que s'il y a très peu de segments mixtes, leur vitesse moyenne $\dot{\gamma}_{mixte}$ est du même ordre que la vitesse $\dot{\gamma}_s$ des segments vis. Cette propriété tient au fait que le glissement plastique est commandé par la nucléation de doubles décrochements de nature mixte, ce qui implique l'égalité des vitesses des segments vis et mixtes :

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_s + \dot{\gamma}_{mixte} \approx 2\rho_m b v_s \tag{35}$$

La théorie du mouvement thermiquement activé des segments vis conduit ainsi à une expression du type :

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G\left(\tau_{eff}^{s}\right)}{k_B T} \right] \qquad \text{avec} \qquad \dot{\gamma}_0 = 2\rho_m \nu_D b^3 \frac{L^2}{l_c^2} \tag{36}$$

L'énergie d'activation liée au mécanisme de double décrochement peut s'exprimer à l'aide du volume d'activation V^* défini comme la dérivée partielle de l'énergie d'activation par rapport à la cission effective :

$$V^* = -\left.\frac{\partial \Delta G}{\partial \tau_{eff}}\right|_{\dot{\varepsilon}} \tag{37}$$

L'expression de l'énergie d'activation devient naturellement :

$$\Delta G\left(\tau_{eff}\right) = \Delta G_0 - V^* \tau_{eff} \tag{38}$$

Le volume d'activation ainsi défini peut, quant à lui, dépendre de la température et de la contrainte effective. Certains auteurs [27] ont proposé des expressions plus explicites de ΔG en fonction de T.

Kocks [28] a proposé une description plus phénoménologique de l'évolution de ΔG en fonction de τ_{eff} :

$$\Delta G\left(\tau_{eff}\right) = \Delta G_0 \left(1 - \left(\frac{\tau_{eff}}{\tau_p} \right)^p \right)^q \tag{39}$$

Cette formulation implique une dépendance en température du volume d'activation V^*. Le terme ΔG_0 définit l'énergie d'activation à contrainte effective nulle, c'est-à-dire sans apport de l'activation thermique, tandis que τ_p désigne la valeur de la friction de réseau, soit la cission nécessaire pour franchir à coup sûr une vallée de Peierls (avec ou sans apport de l'activation thermique). Les paramètres p et q sont reliés au profil des obstacles, autrement dit à la profondeur des vallées de Peierls.

3.3.2 Lois phénoménologiques de comportement « basse température »

Modèle de Mecking et Kocks [13] modifié par Rauch [29] : Le modèle de Mecking et Kocks, dit « modèle à un paramètre », peut constituer une base intéressante à l'écriture d'une loi spécifique aux métaux de structure CC. En effet, il s'applique aisément aux polycristaux et ne fait dépendre l'écrouissage que de la densité de dislocations moyenne ρ. Une première approche consiste à introduire dans ce modèle les spécificités inhérentes au comportement à basse température. Lorsque la température est suffisamment basse pour que l'effet de la friction de réseau sur les dislocations vis se manifeste (de l'ordre de $T_f/10$ pour le fer pur), l'écrouissage du monocristal est profondément modifié et on observe, par exemple au MET, des segments vis très droits. Rauch [29] propose donc d'écrire une loi d'écrouissage phénoménologique du type :

$$\sigma_c = \sigma_{fs}(\dot{\varepsilon}, T) + \alpha\mu b M\sqrt{\rho} \tag{40}$$

Où b correspond au vecteur de Burgers, μ au module de cisaillement, M au facteur de Taylor moyen et α à une constante liée aux interactions entre dislocations. Le terme σ_{fs} correspond à une contrainte seuil incluant à la fois l'effet de la friction de réseau et des solutés sur le mouvement des dislocations et il dépend fortement de $\dot{\varepsilon}$ et T. Le second terme « plus classique » est lié aux interactions de type forêt. Il s'agit d'un terme d'écrouissage qui évolue avec la déformation (à travers ρ) et ne dépend que faiblement de la température (via le module élastique de cisaillement).
Comme pour les métaux CFC, la loi d'évolution des densités de dislocations résulte de la compétition entre les mécanismes de production et d'annihilation de dislocations :

$$\frac{d\rho}{d\gamma^{cum}} = \frac{1}{b\Lambda} - f(\dot{\varepsilon}, T)\rho \tag{41}$$

Où $\gamma^{cum} = M\varepsilon$ désigne le glissement cumulé sur tous les systèmes et $f(\dot{\varepsilon}, T)$ un paramètre relié à l'efficacité des mécanismes d'annihilation, que l'on suppose ici fonction de la température et de la vitesse de déformation. Λ correspond au libre parcours moyen qui est supposé constant car on considère que seuls les joints de grains constituent des obstacles au mouvement des dislocations.
Les équations (40) et (41) conduisent finalement à une expression analytique de la loi de comportement (à $\dot{\varepsilon}$ et T constantes) :

$$\tau_c = \tau_{fs} + \alpha\mu b M\sqrt{\frac{1}{bf\Lambda}\left[1 - \exp(-fM\varepsilon)\right]} \tag{42}$$

Les valeurs des différents paramètres du modèle ont été identifiées à partir de courbes d'essais de cisaillement réalisés sur des monocristaux de fer par Keh *et al.* [30, 31].

Modèle de Rauch [29] : Ce modèle propose une expression de la contrainte interne basée sur les mécanismes spécifiques au comportement des matériaux de structure CC à basse température. Pour ces structures, il existe une température de transition T_a au voisinage de laquelle on observe un changement de mécanismes de plasticité. Le comportement plastique des métaux de structure CC pour $T < T_a$ résulte du mouvement des dislocations vis soumises à une forte friction de réseau (figure 3). Celles-ci se déplacent grâce à la formation thermiquement activée de doubles décrochements. Si l'on considère une dislocation bloquée par des obstacles, celle-ci comporte une partie vis, sur laquelle l'avancée se fait par une succession de doubles décrochements, et une partie « mixte », qui est en réalité constituée d'une accumulation de décrochements.
La contrainte τ requise pour plastifier le matériau doit permettre de générer des doubles décrochements via la contrainte effective τ_{eff} et vaincre la contrainte interne τ_i due aux arbres de la forêt :

$$\tau = \tau_{eff} + \tau_i \tag{43}$$

L'expression de la contrainte interne peut s'obtenir par un bilan énergétique. Sous l'effet de la contrainte effective τ_{eff}, un double décrochement de longueur initiale l_c peut se propager à l'ensemble d'un segment vis de longueur L (figure 3). La contrainte interne qui en résulte

correspond à l'augmentation d'énergie stockée (W_s) dans le matériau du fait de l'accroissement de longueur totale du brin *dL* lors de la propagation du segment vis.

$$dW_s = \tau_i d\gamma \tag{44}$$

En considérant que l'énergie de ligne de la dislocation vaut μb^2, on en déduit une expression simple de la contrainte interne :

$$\tau_i = \frac{dW_s}{d\gamma} = \frac{\mu b^2 dL}{bdA} \tag{45}$$

Où dA définit l'aire balayée lors de la propagation du double décrochement sur la longueur *L*.

Rauch [29] a démontré que la contrainte appliquée se met sous la forme :

$$\tau = \frac{\tau_{eff}}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\tau_{eff}^{\ 2} + 4(\alpha\mu b)^2 \rho} \tag{46}$$

Ce modèle prédit donc une dépendance linéaire de la contrainte appliquée en fonction de la racine carrée de la densité de dislocations à température ambiante. Cependant, on tend à obtenir une dépendance linéaire pour de très basses températures.
Par construction, la transition entre les comportements « basse » et « haute » températures est intégrée dans le modèle d'écrouissage proposé, celui-ci étant basé sur des considérations énergétiques valables pour n'importe quelle température. Il suffit de prendre τ_{eff} nulle dans l'équation (46) pour retrouver l'expression communément admise de la contrainte pour les matériaux CFC et pour obtenir une valeur de α conforme à celle obtenue en considérant un écrouissage de type forêt. Avec la loi d'écrouissage formulée par Rauch, il ne peut y avoir une de transition progressive du comportement sous l'effet de la déformation en cours d'essai à $\dot{\varepsilon}$ et *T* fixées. Pour décrire celle-ci, un modèle dérivé de ceux de Louchet *et al.* [26], de Rauch [29] et de Tabourot *et al.* [15] a été proposé.

Approche probabiliste de l'écrouissage « basse température » - modèle de Stainier, Cuitiño, Ortiz [27]. Ce modèle propose de prendre en compte tout un ensemble de mécanismes caractéristiques du comportement des matériaux de structure CC pour $T<T_a$:

- mécanisme d'avancée des segments vis par doubles décrochements,
- prise en compte de l'écrouissage de type forêt,
- influence d'autres mécanismes tels que le glissement dévié sur la production et l'annihilation des dislocations.

Cette description est basée sur le principe suivant. Sur un système de glissement *(s)*, la cission critique τ_c^s est définie comme étant la somme de la contribution de la contrainte effective résultant de l'activation thermique, d'une part, et de l'écrouissage « forêt », d'autre part. Tous ces mécanismes sont intégrés en utilisant une approche probabiliste, de sorte que cette décomposition de τ_c^s n'apparaît jamais explicitement dans les équations du modèle.

3.4 MODÈLE DE TRANSITION HAUTES / BASSES TEMPÉRATURES

Ce modèle, établi pour les matériaux de structure CC, prend en compte les mécanismes d'activation thermique spécifiques aux basses températures, tels que le mécanisme de doubles

crans ou encore l'activation préférentielle des systèmes de glissement <111>{110} par rapport aux <111>{112}, ainsi qu'une dépendance en température des différents paramètres matériaux [32, 33].

3.4.1 Loi d'écoulement

La loi d'écoulement du modèle est donnée par l'équation (36). L'énergie d'activation $\Delta G\left(\tau_{\text{eff}}^{s}\right)$ est directement reliée à la cission effective τ_{eff}^{s} s'exerçant sur le système *(s)*. Cette cission est égale à la cission appliquée τ^{s} retranchée de la contribution « athermique » τ_{μ}^{s} due aux obstacles (dislocations de type forêt et précipités) :

$$\tau_{\text{eff}}^{s} = \tau^{s} - \tau_{\mu}^{s} \tag{47}$$

Le terme de contrainte « athermique » est mal choisi car certains paramètres de la loi d'évolution des densités de dislocations sont dépendants de la température. On peut cependant distinguer deux contributions, l'une associée au mécanisme élémentaire de double décrochement et l'autre aux interactions avec les obstacles perçant le plan de glissement *(s)*. $\Delta G\left(\tau_{eff}^{s}\right)$ s'exprime à l'aide du volume d'activation V^{*}, qui est défini par l'équation (38).
L'énergie libre d'activation ΔG_0 correspond à l'énergie d'activation pour τ_{eff}^{s}=0, soit la valeur de ΔG dans le régime athermique lorsque l'agitation thermique suffit à assurer le franchissement de la barrière d'énergie et que l'apport de la contrainte effective n'est plus nécessaire. Il faut toutefois noter que le terme V^{*} dépend lui-même de la contrainte effective. Considérer V^{*} constant serait en contradiction avec les essais expérimentaux de sauts de vitesse qui montrent que V^{*} est fortement dépendant de T. $\Delta G\left(\tau_{\text{eff}}^{s}\right)$ est donnée par la formule (39). Les paramètres p et q traduisent l'allure du potentiel d'énergie associé à l'obstacle (ici les barrières de Peierls), tandis que τ_R est une constante qui désigne la contrainte effective à fournir pour créer un double décrochement à T = 0 K.

3.4.2 Loi d'écrouissage

L'évolution de l'écrouissage repose sur la compétition entre les interactions à courte et longue distance entre les dislocations. Les interactions à courte distance désignent essentiellement la friction de réseau qui génère une contrainte effective τ_{eff}^{s}. Les interactions à longue distance résultent, quant à elles, de la présence de dislocations « forêt » et de précipités : il faut fournir respectivement une contrainte τ_{i}^{s} pour vaincre les arbres de la forêt et une contrainte τ_0 pour franchir les précipités. La contrainte d'écoulement τ^{s} requise pour activer le glissement plastique est alors égale à la somme de ces trois contributions :

$$\tau^{s} = \tau_0 + \tau_{eff}^{s} + \tau_{i}^{s} \tag{48}$$

Le modèle proposé par Rauch établit une expression particulière de la contrainte interne τ_{i}^{s}. En raisonnant sur un brin de dislocation épinglé sur deux obstacles et présentant une partie vis soumise à la friction de réseau, ainsi qu'une partie mixte, τ_{i}^{s} s'écrit :

$$\tau_i^s = \frac{(\alpha\mu b)^2 \rho}{\tau^s} \tag{49}$$

Le terme ρ désigne la densité totale de dislocations perçant le plan *(s)*. Afin de représenter individuellement l'interaction de chaque système *(s)* avec chacun des 23 autres systèmes *(u)* potentiellement latents, le terme $\alpha^2\rho$ est remplacé par $\sum_u a^{su} \rho^u$.

Si l'effet des précipités est pris en compte en retranchant τ_0 au dénominateur dans l'expression (50), l'expression de τ_i^s devient :

$$\tau_i^s = \frac{(\mu b)^2 \sum_u a^{su} \rho^u}{\tau^s - \tau_0} \tag{50}$$

La combinaison des équations (48) et (50) permet d'en déduire une expression de la contrainte d'écoulement τ^s, définissant ainsi la loi d'écrouissage :

$$\tau^s = \tau_0 + \frac{\tau_{eff}^s}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{{\tau_{eff}^s}^2 + 4(\mu b)^2 \sum_u a^{su} \rho^u} \tag{51}$$

τ^s dépend par conséquent de deux types de variables :

- la cission effective qui dépend de T et $\dot{\varepsilon}$ mais pas de l'état de déformation local ;
- les densités de dislocations locales ρ^s sur tous les systèmes qui sont reliées à la déformation locale.

À partir de l'expression de l'équation (51), il est possible de retrouver deux expressions caractéristiques des comportements « haute » et « basse » températures :

- Dans le cas du comportement « haute température », le terme τ_{eff}^s devient négligeable devant les autres termes et on retrouve alors la loi d'écrouissage du modèle de Tabourot *et al.* [14, 15].
- Dans le cas du comportement « basse température », le mécanisme de double décrochement devient prépondérant et τ_i^s devient négligeable par rapport à τ_{eff}^s et l'expression (51) permet alors de déduire la relation :

$$\tau^s = \tau_{eff}^s + \frac{(\mu b)^2 \sum_u a^{su} \rho^u}{\tau_{eff}^s} \tag{52}$$

Dans ce cas précis, la dépendance entre la contrainte d'écoulement et la densité de dislocations tend à devenir linéaire. Ce type de dépendance a été observé expérimentalement dans le fer α déformé à basse température [30], [31]. La loi d'écrouissage (51) assure alors de façon continue cette transition de régime de comportement.

La plasticité à froid dans les métaux de structure CC se caractérise également par une non équivalence des systèmes de glissement <111>{110} et <111>{112}. Ces derniers systèmes tendent à s'activer de plus en plus difficilement lorsque la température diminue. D'autre part,

ce phénomène s'accompagne d'une asymétrie des systèmes de glissement <111>{112}. La nature de ces mécanismes étant encore mal comprise, l'écart entre les familles de systèmes {110} et {112} a été identifié sur les résultats expérimentaux obtenus sur le fer pur [32, 33]. L'écart entre les familles de systèmes est décrit par deux valeurs de τ_0 suivant les systèmes {110} ou {112} :

$$\tau_0^{\{110\}} = \tau_0 \tag{53}$$

$$\tau_0^{\{112\}\text{moyen}} = \frac{\tau_0^{\{112\}\text{f}} + \tau_0^{\{112\}\text{d}}}{2} = \tau_0 + \text{f(T)} \tag{54}$$

Il est à noter que le phénomène d'asymétrie du glissement n'est pas pris en compte dans le modèle. La cission exercée sur les systèmes {112} est calculée comme étant la moyenne de la cission dans le sens de glissement dit « facile » et dans le sens « difficile ».

Au-dessus d'une valeur critique de la température T_c, l'écart est identiquement nul (f(T) = 0) et en dessous de cette valeur critique, l'écart f(T) pour du fer α est bien corrélé par une fonction linéaire de la température absolue T :

$$\text{f(T)} = -0{,}36\,\text{T} + 74 \tag{55}$$

3.4.3 Loi d'évolution des densités de dislocations

La loi d'évolution des densités de dislocations est celle donnée par l'équation (19). Pour tenir compte de l'évolution des mécanismes élémentaires de plasticité lorsque $T < T_a$, K et y_c sont fonction de la température T.
Dans l'expression du libre parcours moyen Λ^s, les obstacles sont à la fois constitués par les interfaces entre joints de grains ou joints de phases et les dislocations perçant le plan de glissement du système *(s)*. Le paramètre K est relié à l'efficacité du mécanisme de multiplication des dislocations : plus la valeur de K est grande et moins les sources de dislocations sont efficaces. Comme les mécanismes de multiplication sont affectés par la transition de comportement plastique, K doit dépendre de la température. Toutefois, les mécanismes de multiplication opérant à $T < T_a$ sont mal connus à l'échelle de la plasticité cristalline et K doit donc être identifié sur des essais mécaniques à chaque température.
D'autre part, dans l'équation (21), le processus d'annihilation est relié au mécanisme de glissement dévié qui permet à des dislocations de signe opposé de s'annihiler. Or le mécanisme de glissement dévié est activé thermiquement et, rigoureusement, l'énergie d'activation associée à ce mécanisme devrait dépendre de la cission effective sur le plan de glissement dévié. Pour simplifier, la distance critique d'annihilation y_c est supposée suivre une loi de type Arrhenius à deux paramètres :

$$\text{y}_\text{c}(\text{T}) = \text{y}_{\text{c0}} \exp\left[-\frac{\text{E}_{\text{yc}}}{\text{k}_\text{B}\text{T}} \right] \tag{56}$$

L'énergie d'activation E_{yc} et le terme pré-exponentiel y_{c0} sont considérés constants. Cette loi phénoménologique permet de décrire continûment l'évolution du mécanisme d'annihilation en fonction de la température.

4 CADRE DE LA MODÉLISATION DESCRIPTION DU FORMALISME EN GRANDES TRANSFORMATIONS

Peirce *et al.* [1] sont les précurseurs de ces méthodes, qui ont été par la suite améliorées par Teodosiu [14], puis transposées à différents problèmes et couplées à d'autres logiciels.

Ce paragraphe décrit la façon dont les équations du modèle de comportement sont introduites dans le cadre des grandes transformations. Les lois de comportement, ainsi que le schéma d'intégration décrit plus bas, sont introduits dans les codes éléments finis à l'aide d'un sous-programme utilisateur (de type UMAT pour les logiciels ABAQUS™ et CAST3M).

Le formalisme est basé sur la décomposition (figure 4) du tenseur gradient de transformation $\underline{\underline{F}}$ en deux contributions, la première élastique $\underline{\underline{F}}^e$ et la seconde plastique $\underline{\underline{F}}^p$ [34] :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^e \underline{\underline{F}}^p \tag{57}$$

Le passage de la configuration initiale C_0 à la configuration déformée $C(t)$ s'effectue via une configuration intermédiaire $C^*(t)$. La première étape de déformation correspond au glissement plastique entre plans et la seconde aux rotations de réseau et aux dilatations élastiques.

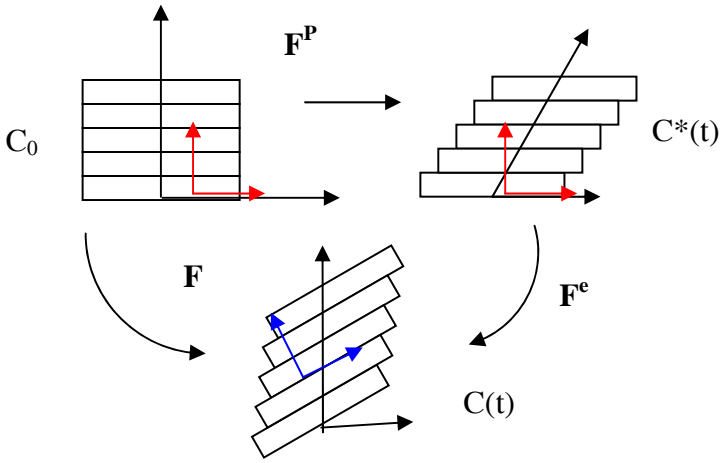


Fig. 4. *Décomposition du tenseur gradient de la déformation* $\underline{\underline{F}}$.

Dans le repère C_0, la normale au plan de glissement et la direction de glissement du système (s) sont définies par le couple de vecteurs $(\vec{n}_0^s, \vec{m}_0^s)$. La transformation plastique $\underline{\underline{F}}^p$ ne modifie pas l'orientation de ces vecteurs. La transformation élastique $\underline{\underline{F}}^e$ introduit, du fait des conditions aux limites, une rotation de ces vecteurs qui se transforment en $(\vec{n}^s, \vec{m}^s)$.

Lorsqu'on adopte cette décomposition, le gradient de vitesses $\underline{\underline{L}}$ s'exprime :

$$\underline{\underline{L}} = \dot{\underline{\underline{F}}}\ \underline{\underline{F}}^{-1} = \dot{\underline{\underline{F}}}^e \underline{\underline{F}}^{e^{-1}} + \underline{\underline{F}}^e \dot{\underline{\underline{F}}}^p \underline{\underline{F}}^{p^{-1}} \underline{\underline{F}}^{e^{-1}} \tag{58}$$

Si on note respectivement $\underline{\underline{L}}^{p*}$ et $\underline{\underline{L}}^{e}$ les gradients de transformation associés à la première et à la seconde étape de la transformation, alors le tenseur $\underline{\underline{L}}$ peut s'écrire comme la somme de

sa composante élastique et de sa composante plastique transportée dans la configuration actuelle *C(t)* :

$$\underline{\underline{L}} = \underline{\underline{L}}^{e} + \underline{\underline{F}}^{e}\,\underline{\underline{L}}^{p^*}\,\dot{\underline{\underline{F}}}^{e^{-1}} \tag{59}$$

Dans la configuration intermédiaire, le gradient de vitesses est associé au glissement plastique entre les différents plans de glissement définis par ($\vec{m}^{s^*}$, $\vec{n}^{s^*}$) et le tenseur $\underline{\underline{L}}^{p^*}$ s'écrit :

$$\underline{\underline{L}}^{p^*} = \dot{\underline{\underline{F}}}^{p}\,\underline{\underline{F}}^{p^{-1}} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{s}\,\underline{\underline{L}}^{s^*} \qquad \text{avec} \quad L^{s^*} = \vec{m}^{s^*} \otimes \vec{n}^{s^*} \tag{60}$$

La partie plastique du gradient des vitesses peut également se décomposer en deux contributions symétrique $\underline{\underline{D}}^{p^*}$ et antisymétrique $\underline{\underline{W}}^{p^*}$, définies à partir des tenseurs $\underline{\underline{D}}^{s^*}$ et $\underline{\underline{W}}^{s^*}$:

$$\underline{\underline{D}}^{p^*} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{s}\,\underline{\underline{D}}^{s^*} \qquad \text{avec} \quad \underline{\underline{D}}^{s^*} = \vec{m}^{s^*} \otimes_{S} \vec{n}^{s^*} \tag{61}$$

$$\underline{\underline{W}}^{p^*} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{s}\,\underline{\underline{W}}^{s^*} \qquad \text{avec} \quad \underline{\underline{W}}^{s^*} = \vec{m}^{s^*} \otimes_{A} \vec{n}^{s^*} \tag{62}$$

Dans le cadre du modèle, nous supposons de petites déformations élastiques et de grandes rotations du réseau cristallin. Cette hypothèse peut être mise en équations via la décomposition polaire du tenseur $\underline{\underline{F}}^{e}$:

$$\underline{\underline{F}}^{e} = \underline{\underline{V}}\,\underline{\underline{R}} \tag{63}$$

où la contribution $\underline{\underline{V}}$ est une dilatation pure et $\underline{\underline{R}}$ une rotation pure. L'hypothèse des petites déformations élastiques nous permet d'écrire $\underline{\underline{V}}$ sous la forme :

$$\underline{\underline{V}} = \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{\varepsilon}} \qquad \text{avec} \quad \underline{\underline{\varepsilon}} << 1 \tag{64}$$

Cette forme particulière du tenseur $\underline{\underline{V}}$ nous permet de simplifier la loi de comportement hypoélastique qui lie la dérivée objective du tenseur des contraintes de Cauchy au tenseur taux de déformation élastique $\underline{\underline{D}}^{e}$, partie symétrique de $\underline{\underline{L}}^{e}$:

$$\hat{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{\kappa}}}}^{e} : \underline{\underline{D}}^{e} \tag{65}$$

Nous utilisons la dérivation objective de Jaumann qui consiste à transposer la quantité à dériver (ici $\underline{\underline{\sigma}}$) dans une configuration de référence. Le tenseur $\underline{\underline{W}}^{e}$, partie antisymétrique de $\underline{\underline{L}}^{e}$, correspond aux taux de rotation entre la configuration intermédiaire *C*(t)* et la configuration actuelle *C(t)*.

L'utilisation des dérivées objectives permet de vérifier l'indépendance de la loi de comportement par rapport au référentiel [35].

$$\hat{\underline{\underline{\sigma}}} = \dot{\underline{\underline{\sigma}}} + \underline{\underline{\sigma}}\,\underline{\underline{W}}^{e} - \underline{\underline{W}}^{e}\,\underline{\underline{\sigma}} \tag{66}$$

Dans le cas le plus général, le tenseur $\underline{\underline{\underline{\underline{\kappa}}}}^{e}$ est défini à partir de la densité d'énergie par unité de volume non déformé $w\left(\underline{\underline{E}}^{e}\right)$:

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\kappa}}}}^{e} = \left[\det\left(\underline{\underline{F}}^{e^{-1}}\right)\right]\underline{\underline{F}}^{e}\left[\underline{\underline{F}}^{e}\frac{\partial^2 w\left(\underline{\underline{E}}^{e}\right)}{\partial\underline{\underline{E}}^{e}\partial\underline{\underline{E}}^{e}}\right] \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{E}}^{e} = \tfrac{1}{2}(\underline{\underline{F}}^{eT}\underline{\underline{F}}^{e} - \underline{\underline{I}}) \tag{67}$$

L'équation (67) permet de simplifier l'expression de $\underline{\underline{\underline{\underline{K}}}}^{e}$ en réalisant un développement de Taylor de $w\left(\underline{\underline{E}}^{e}\right)$. On montre alors que, lorsque $\left|\underline{\underline{\varepsilon}}\right| \to 0$, avec $\underline{\underline{\tau}} = \det(\underline{\underline{F}})\underline{\underline{\sigma}}$,

$$\underline{\underline{\underline{\underline{\kappa}}}}^{e} = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{e} \qquad \text{avec} \quad C^{e}_{ijkl} = R_{ip}\,R_{jq}\,R_{km}\,R_{ln}\,C^{e*}_{pqmn} \qquad \dot{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{e} : \underline{\underline{D}}^{e} + \underline{\underline{W}}^{e}\,\underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}}\,\underline{\underline{W}}^{e} \tag{68}$$

Il est plus pratique d'exprimer $\dot{\underline{\underline{\sigma}}}$ en fonction de $\underline{\underline{D}}$, $\underline{\underline{D}}^{p}$, $\underline{\underline{W}}$ et $\underline{\underline{W}}^{p}$:

$$\dot{\underline{\underline{\sigma}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{e} : \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{W}}\,\underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}}\,\underline{\underline{W}} - \sum_{s}\dot{\gamma}^{s}\,\underline{\underline{R}}^{s} \tag{69a}$$

$$\text{avec} \quad \underline{\underline{R}}^{s} = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{e} : \underline{\underline{D}}^{s} + \underline{\underline{W}}^{s}\,\underline{\underline{\tau}} - \underline{\underline{\tau}}\,\underline{\underline{W}}^{s} \tag{69b}$$

L'hypothèse des petites déformations élastiques nous permet également de calculer l'évolution de la rotation de réseau cristallin :

$$\dot{\underline{\underline{R}}} = \underline{\underline{R}}\left(\underline{\underline{W}} - \sum_{s}\dot{\gamma}^{s}\,\underline{\underline{W}}^{s*}\right) \tag{70}$$

Plusieurs techniques d'intégration des différentes équations différentielles sont possibles.
Les méthodes explicites de type Runge-Kutta peuvent être utilisées lors de la mise au point d'un modèle, car elles ne nécessitent pas de développement spécifique à chaque modèle qu'il soit macroscopique ou cristallin.
Pour les calculs d'agrégats, il est d'usage courant, depuis sa première utilisation par Peirce *et al.* [1], d'intégrer le système différentiel associé au modèle selon la méthode dite du « forward gradient ». Cette méthode de résolution consiste à faire apparaître un système linéaire permettant de calculer les amplitudes du glissement $\Delta\gamma^{s}$ sur chaque incrément de temps :

$$\sum_{u} N^{su}\Delta\gamma^{u} = \left[\dot{\gamma}^{s}(t) + \underline{\underline{Q}}^{s} : \underline{\underline{L}}\right]\Delta t \tag{71}$$

Pour cela, il est nécessaire d'expliciter les incréments de cission $\Delta\tau^s$ et de cission critique $\Delta\tau_c^s$ en fonction de $\Delta\gamma^s$ via les différentes équations du modèle afin d'obtenir les teneurs N^{su} et $\underline{\underline{Q}}^s$. Connaissant les incréments de glissement $\Delta\gamma^s$ sur chaque système, il suffit d'en déduire les différentes grandeurs mécaniques nécessaires (contraintes, rotation du réseau cristallin, densités de dislocations…) en fin de pas de temps (t+Δt). Il est important de noter que l'écriture du système linéaire (71) est spécifique de chaque modèle cristallin et peut être relativement complexe à obtenir selon les lois utilisées.

5 EXEMPLES

Trois exemples de simulations couplées à l'endommagement et à la recristallisation sont présentés ci-dessous. Les lois de comportement et d'écrouissage sont celles données par le modèle de Teodosiu, Raphanel, Tabourot [14] (exemple du § 5.2) ou le modèle décrivant la transition fragile/ductile (exemple du § 5.3). À chaud, les lois de comportement et d'écrouissage sont modifiées pour tenir compte de l'effet de la température (exemple du § 5.1). Ces lois de comportement et d'écrouissage dépendent de paramètres qui ont été soit identifiés physiquement, soit obtenus par méthode inverse à partir d'essais mécaniques macroscopiques. D'un point de vue numérique, tous les exemples présentés ci-dessous ont été simulés à l'aide du logiciel ABAQUS™ en utilisant le schéma d'intégration semi-implicite décrit au paragraphe précédent, schéma de type « forward gradient » adapté à chacune des lois utilisées dans les trois modèles exposés ci-après.

5.1 MODÉLISATION DU FORGEAGE À CHAUD D'UN ALLIAGE DE TITANE

Le forgeage à chaud des alliages de titane quasi-β dans le domaine β modifie fortement la morphologie des grains et les textures locale et globale finales, ce qui n'est pas sans conséquence sur l'amorçage de l'endommagement. Dans ce type d'étude, une description précise de l'agrégat est nécessaire [6, 36] pour obtenir la texture initiale du matériau. L'agrégat 3D est formé de 30 couches de grains, réalisé par polissages manuels successifs où l'orientation cristalline des grains de chaque couche obtenue a été déterminée par EBSD. La reconstruction tridimensionnelle de l'agrégat est faite numériquement (figure 5).

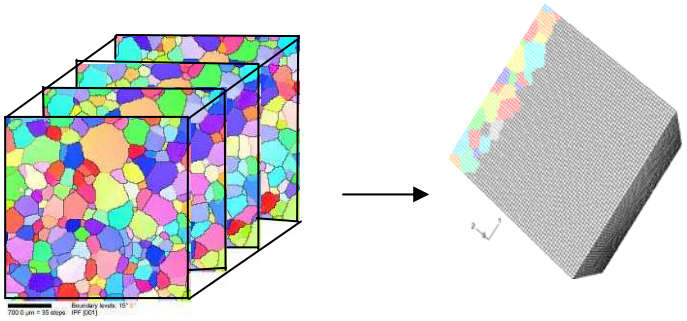


Fig. 5. *Agrégat de Ti17 obtenu par polissage et analyse EBSD après montée en température au-dessus du transus β suivie d'une trempe à l'eau pour conserver la microstructure à chaud.*

Avant forgeage, le matériau est chauffé puis trempé afin de retenir la microstructure CC qui correspond ici à la microstructure forgée. Celle-ci présente des gros grains d'environ 300 µm. Les textures obtenues par EBSD varient localement suivant les zones analysées, seules les textures obtenues par diffraction de neutrons donnent des résultats fiables.

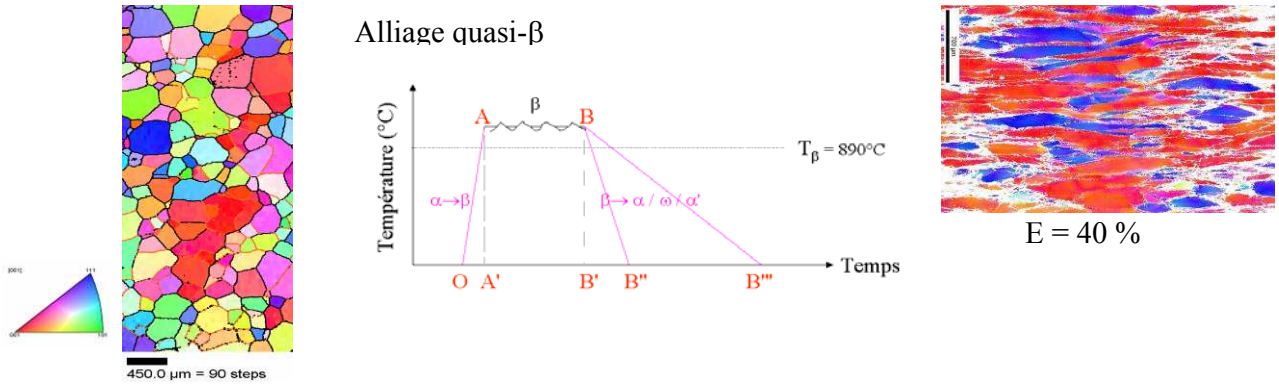


Fig. 6. *Cartographie donnant l'orientation de l'axe de forgeage dans le domaine β, avant et après forgeage.*

La figure 6 donne l'orientation de l'axe de forgeage avant forgeage et après forgeage de 40 % au-dessus du transus β. La texture expérimentale après forgeage présente d'amas (« clusters ») de grains millimétriques dont l'axe de forgeage est parallèle aux directions cristallographiques <100> et <111>.

Le modèle cristallin utilisé est proche du modèle de Tabourot mais a été adapté aux hautes températures avec une loi d'évolution des dislocations dépendant de la température. L'agrégat est déformé en compression simple, sans prendre en compte le frottement. Le matériau ne présente pas de recristallisation.

La simulation numérique met en évidence des hétérogénéités de déformation et de contrainte. La distribution des contraintes au sens de von Mises après 40 % de déformation macroscopique imposée présente deux pics qui peuvent correspondre à deux familles de grains formés (figure 7).

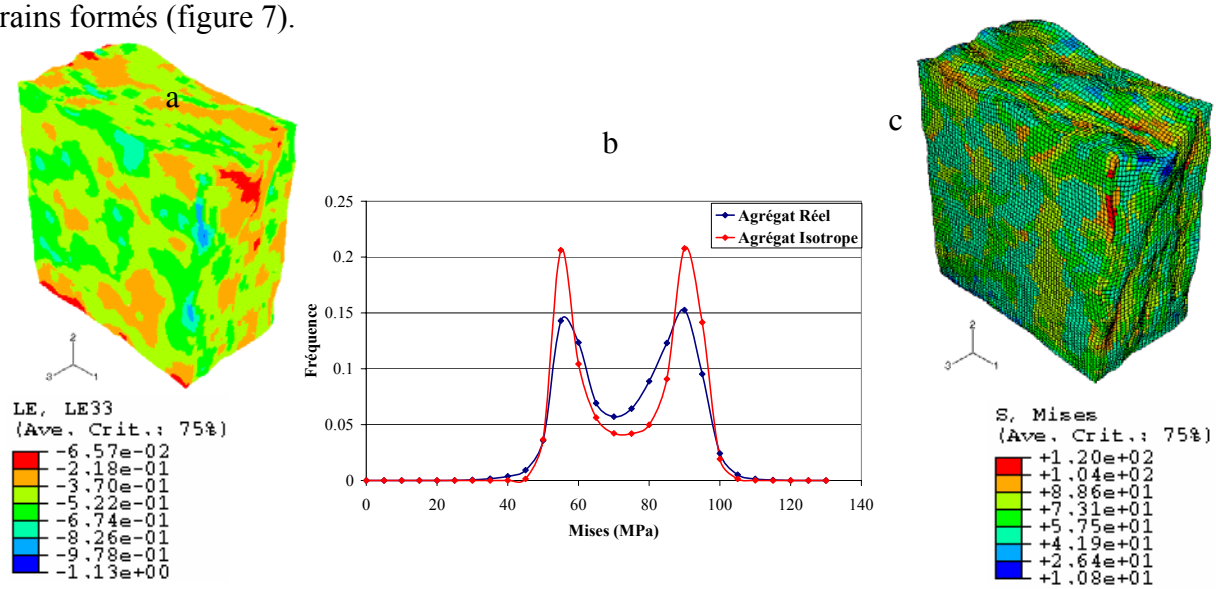


Fig. 7. *Cartes de la déformation (a) et de la contrainte de von Mises (c), histogramme des contraintes de von Mises (b). L'axe de forgeage est parallèle à l'axe 3.*

La simulation des nouvelles orientations cristallines montre que les grains initiaux ont tourné de manière que les directions [001] et [111] deviennent parallèles à l'axe de forgeage. Il se forme donc deux familles de grains millimétriques formés de grains ayant un axe [001] ou [111] parallèle à l'axe de forgeage, comme le montre la coupe de la figure 8.

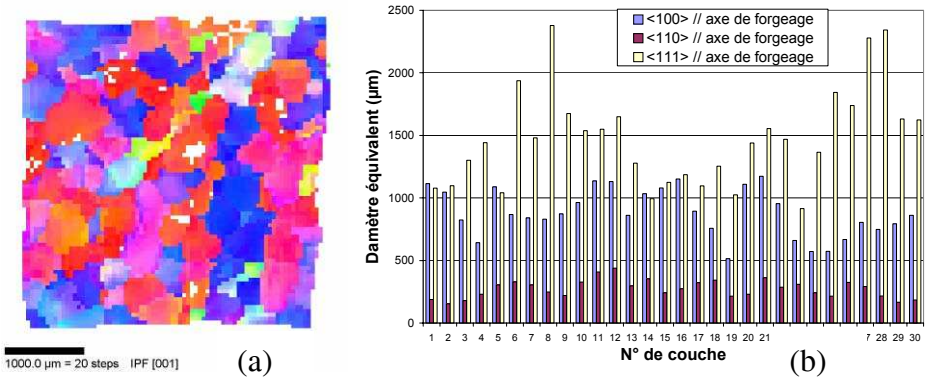


Fig. 8. *(a) Simulation de l'orientation de l'axe de forgeage dans une couche de l'agrégat de Ti17. (b) Diamètre des grains pour les 3 principales composantes de texture (graphe déduit des textures et des tailles de grains obtenus par simulation).*

Les rotations cristallines des grains, comme les déformations et les contraintes, sont hétérogènes et une étude couche par couche de l'agrégat montre qu'il y a un renforcement des composantes {100} et {111}, en bon accord avec la texture expérimentale.

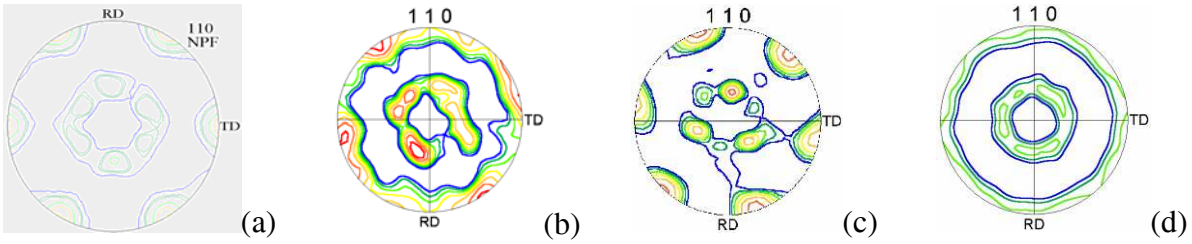


Fig. 9. *Figures de pôles {110} du Ti 17 après forgeage : (a) mesure par diffraction de neutrons après 60 % de déformation, (b) simulation pour une couche seule, (c) pour l'agrégat réel, (d) pour l'agrégat isotrope.*

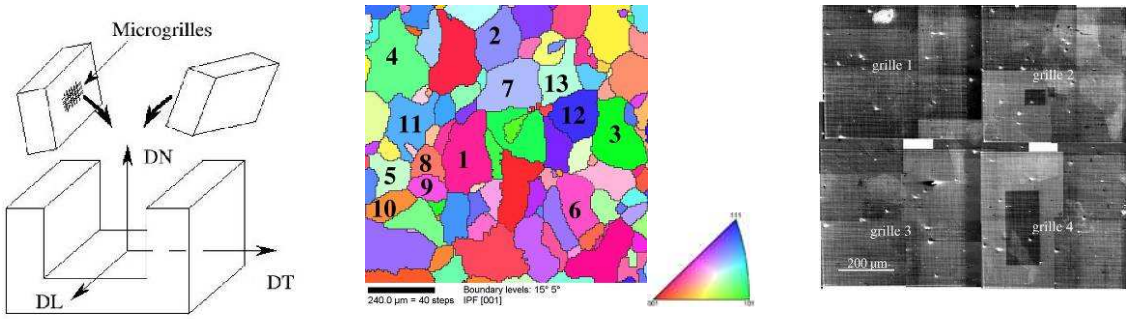
Remarque : l'intérêt de mettre dans l'agrégat des orientations réelles est visible sur la figure 9. La figure 9(d) correspond à la texture de l'agrégat de la figure 5, mais avec des orientations aléatoires. On obtient une figure de pôles classique du forgeage, sans l'effet mémoire de la texture du matériau d'origine.
Cette étude a mis en évidence, l'existence de deux familles de grains millimétriques obtenues par rotation des grains pendant le forgeage, vers les axes stables <001> et <111]. Les nouveaux grains ainsi formés sont de taille millimétrique appelés « macrozones » [37]. Ces nouveaux grains contrôlent l'endommagement car certaines familles d'orientations sont plus propices à la multifissuration en fatigue que d'autres.

5.2 Simulation de la recristallisation d'un tôle d'acier laminée. Couplage déformation-recristallisation

Dans l'objectif de déterminer la texture de recristallisation après laminage, d'un acier faiblement allié, un couplage déformation-recristallisation a été effectué à partir de deux modèles, l'un de déformation, l'autre de recristallisation [38, 39, 40]. Expérience et simulation numérique sont menées de front afin de s'alimenter mutuellement.

Étude expérimentale : Le laminage est représenté par un essai de compression plane. Les tests sont menés sur un acier IF. L'échantillon est coupé en deux, des grilles sont déposées sur

chaque face interne de l'échantillon et une analyse EBSD est effectuée sur le domaine délimité par les grilles. L'échantillon est comprimé jusqu'à 40 % et les nouvelles orientations cristallines des grains sont mesurées par EBSD. Puis l'échantillon est recristallisé à T = 640 °C et les orientations des nouveaux germes du domaine sélectionné sont suivies à différentes étapes de la recristallisation qui est complète au bout de 4600 minutes.

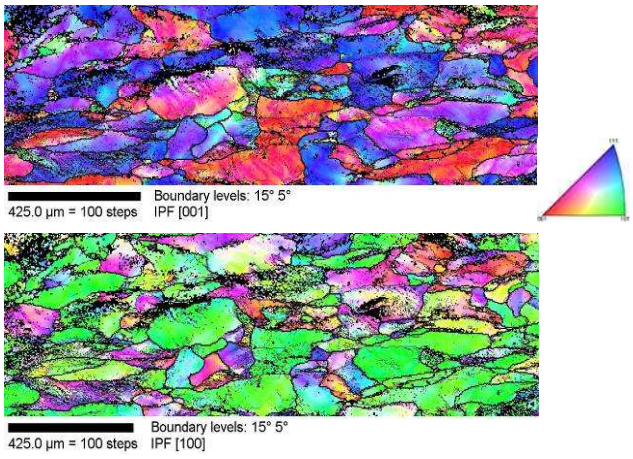


(a) **(b)** **(c)**

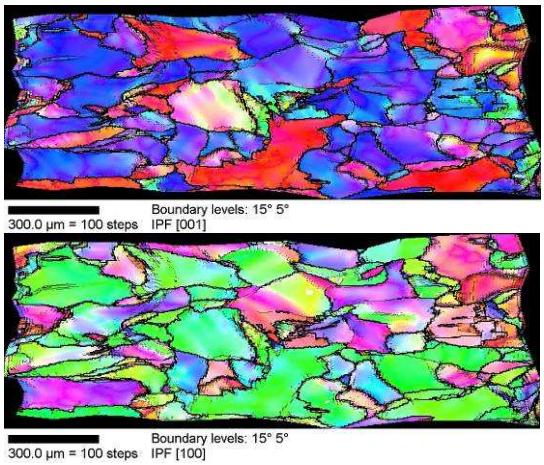
Fig.10. *Étude expérimentale de déformation plane.*
(a) Matrice de compression plane et échantillon coupé en deux avec des microgrilles déposées au centre.
(b) Cartographie des orientations de l'axe de compression, surface de l'échantillon (131 grains) analysée par EBSD avant le dépôt des microgrilles et de la déformation.
(c) Grilles déposées sur la surface analysée (pas de la grille 4µm).

Simulation numérique des champs mécaniques et de l'énergie stockée - Comparaison avec l'expérience :

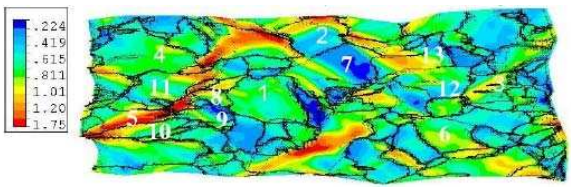
Le modèle utilisé est celui de Tabourot. L'agrégat est constitué d'une couche de 131 grains extrudée et maillée avec 29068 éléments (de type *C3D8R*). Les conditions aux limites appliquées à l'agrégat sont les déplacements mesurés sur la grille expérimentale. Les déplacements sont supposés varier linéairement sur chaque incrément de temps.



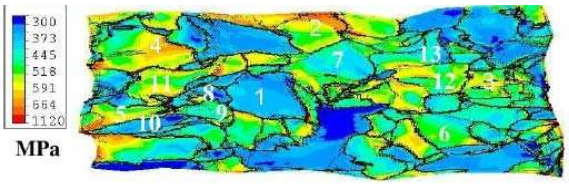
(a) Expérience : orientation de l'axe de compression DN et l'axe DT.



(b) Simulation numérique : orientation de l'axe de compression DN et de l'axe DT.



(c) Simulation numérique : champ de la déformation équivalente.



(d) Simulation numérique : champ de la contrainte équivalente de von Mises.

Fig. 11. *Comparaison de l'orientation des axes DN et DL avant et après compression plane : (a) résultats expérimentaux, (b) résultats numériques, (c) cartographie de la déformation équivalente, (d) cartographie de la contrainte équivalente de von Mises.*

L'énergie stockée est déduite de la formule :

$$E^{\rho} = \frac{1}{2}\mu b^2 \rho^{tot} \qquad (72)$$

Où ρ^{tot} est la densité de dislocations totale calculée dans chaque élément du maillage.

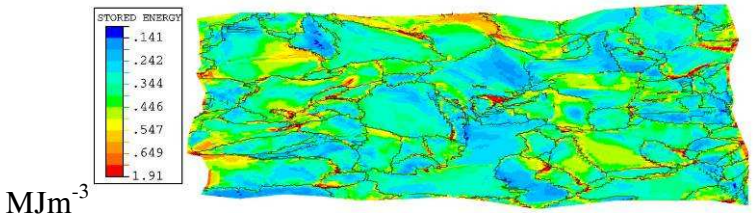


Fig. 12. *Carte de l'énergie stockée obtenue par simulation numérique de l'agrégat de la figure 10.*

On constate que :

- Les maxima d'énergie stockée sont aux joints de grains et points triples.
- Les zones intragranulaires désorientées présentent des gradients d'énergie, mais les valeurs sont plus faibles qu'aux joints.
- Les valeurs les plus élevées concernent la fibre γ {111}<uvw>, comme le montre la carte des énergies calculée dans l'espace d'Euler (φ_2 = 45°).

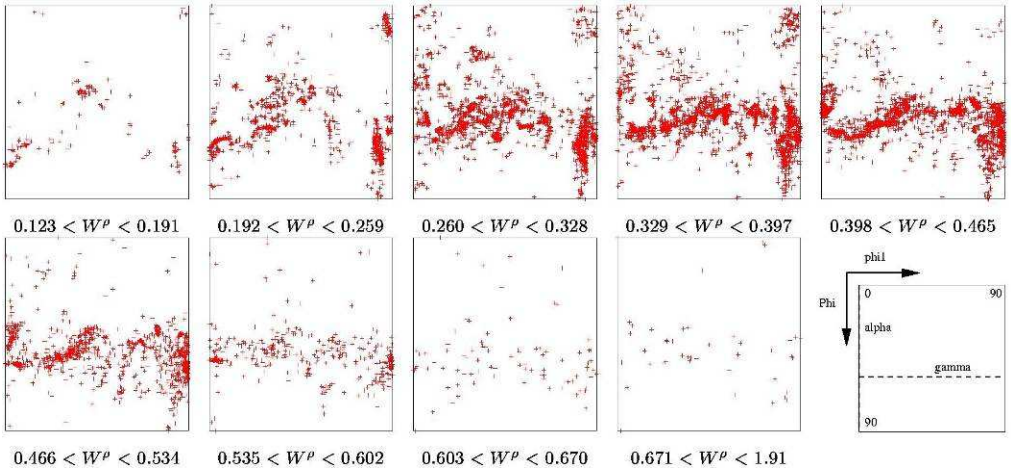


Fig. 13. *Énergie stockée calculée dans la coupe à φ_2 =45° de l'espace d'Euler.*

Simulation de la recristallisation (restauration/germination/croissance) [38, 41, 42] :

Restauration : En l'absence d'informations précises sur les mécanismes de restauration du fer α , la restauration est supposée isotrope. Elle est modélisée par la relation cinétique suivante :

$$ {}^{t}E_{st}^{v} - {}^{l}E_{r}^{v} = \left({}^{0}E_{st}^{v} - {}^{l}E_{r}^{v} \right) \exp\left(-\frac{t}{t_r} \right) \tag{73} $$

Avec

${}^{0}E_{st}^{v}$	énergie stockée initiale,
${}^{t}E_{st}^{v}$	énergie stockée à l'instant t,
t_r	constante de temps caractérisant la vitesse de restauration.

Conditions aux limites : Afin qu'il n'y ait pas d'artefact de recristallisation en bordure de l'agrégat, un voisin virtuel a été défini afin qu'aucune mobilité n'existe avec le site de bordure.

Germination **:** Il y a germination dans les sites de plus forte énergie stockée. L'énergie stockée en un site est calculée numériquement en fonction de la densité de dislocations totale sur ce site par :

$$ \mathrm{E_{st}^{v}} = \frac{1}{2} \mu b^2 \rho^{\mathrm{tot}} \mathrm{V} \tag{74} $$

où V est le volume du site Monte Carlo.
La probabilité de germination du site (v) est donnée par :

$$ \mathrm{P_g^v} = 1 - \exp\left(-\frac{\mathrm{E_{st}^{v}} - {}^{1}\mathrm{E_g}}{{}^{2}\mathrm{E_g} - {}^{1}\mathrm{E_g}} \right) \tag{75} $$

Il y a germination si $\mathrm{P_g^v} \geq \mathrm{P}$, *P* étant un nombre aléatoire compris entre 0 et 1. Si le site est un germe, il garde son orientation cristallographique mais son énergie stockée est mise à zéro.

Cette équation est calculée si et seulement si :

$$ \mathrm{E_{st}^{v}} - {}^{1}\mathrm{E_g} \geq 0 \tag{76} $$

${}^{1}E_g$ et ${}^{2}E_g$ sont des paramètres représentant les énergies cinétiques de germination. Si ces énergies sont très proches, tous les germes apparaissent dès le début de la simulation (germination saturée). Si ${}^{2}E_g$ est très inférieure à ${}^{1}E_g$, alors de nouveaux germes peuvent apparaître tout au long de la simulation (germination continue).

Croissance : Dans l'algorithme de Monte Carlo, un site (site 2) est tiré au hasard ainsi qu'un site proche voisin (site 1). La croissance est autorisée si le site 2 est recristallisé. La probabilité de croissance d'un germe v est donnée, pour l'incrément de temps t_{inc}, par :

$$ \mathrm{P_c^v} = \frac{\mathrm{V^{v-v'}} t_{\mathrm{inc}}}{\mathrm{d^{v-v'}}} = \frac{\Delta \mathrm{E}\, \mathrm{M^{v-v'}} t_{\mathrm{inc}}}{\mathrm{d^{v-v'}}} \tag{77} $$

Avec

$V^{v-v'} = M^{v-v'} \Delta E$ vitesse de l'interface entre les deux sites,

$\Delta E = E_i^1 - E_f^1$ variation d'énergie volumique entre l'énergie du site 1 dans l'état initial (issu de la simulation numérique) et la configuration finale où celui-ci peut être recristallisé.

E_f^1 s'exprime en fonction de l'énergie de surface du site 1 et de ses 6 sites voisins.
$E_f^1 = \sum_{\nu=1à6} \gamma^{1-\nu} S^{1-\nu}$ où $\gamma^{1-\nu}$ l'énergie de surface entre les sites 1 et ν [43].

$M^{\nu-\nu'}$ mobilité de l'interface séparant les sites ν et ν'. Celle-ci s'exprime en fonction de la désorientation des deux sites [44].

Choix des paramètres : Les paramètres utilisés dans la modélisation sont donnés dans le tableau 1.

Tableau 1. Paramètres utilisés pour la simultation de la recristallisation.

Structure	$d^{\nu-\nu'}$	3.10^{-6}	*(m)*
Germination	${}^1E_g$	$2{,}02.10^{-11}$	*(J)*
	${}^2E_g$	$2{,}03.10^{-11}$	*(J)*
Croissance	γ_0	2.10^{-2}	$(J.m^{-2})$
	M_0	320	$(m.J^{-1}.s^{-1})$
Restauration	t_r	21800	*(s)*
	${}^1E_r^{\nu}$	$0{,}1E_{st}^{\nu}$	

Résultats de la simulation Monte Carlo :
Les résultats de la simulation par éléments finis de la compression plane de l'agrégat sont envoyés vers une grille Monte Carlo (MC) régulière (figure 14).
À chaque site de la grille est attribué :

- une orientation cristalline sous forme d'un triplet d'angles d'Euler (φ_1, ϕ, φ_2),
- les valeurs de l'énergie stockée (calculée à partir de la densité de dislocations).

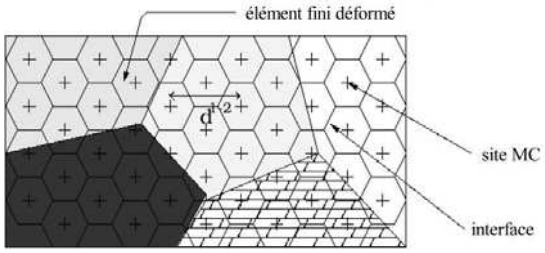
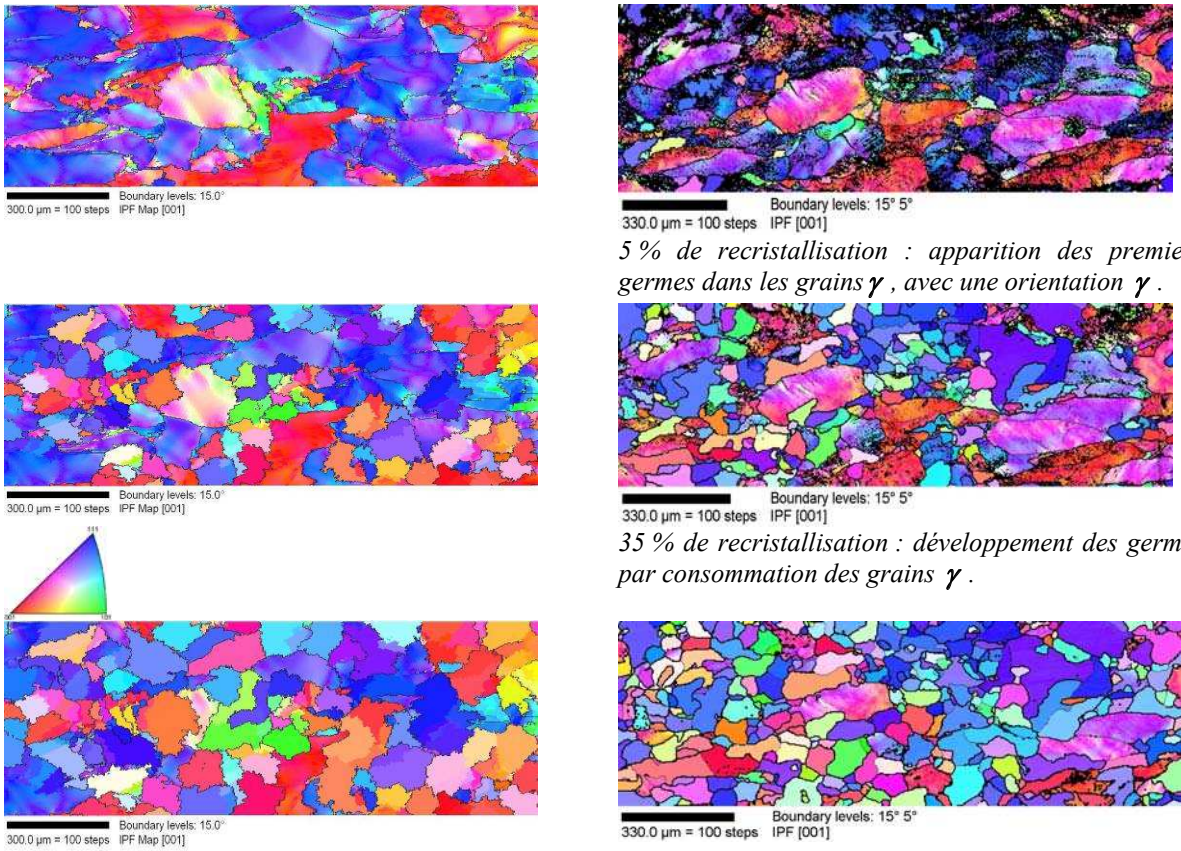


Fig. 14. *Grille utilisée pour la simulation Monte Carlo.*

Les figures de pôles inverses et les figures de pôles donnant l'orientation des axes de l'éprouvette (agrégat) dans le repère cristallin de chaque grain montrent que :

- La texture des germes simulée est en bon accord avec la prévision des orientations des germes.
- Le taux de germination est plus élevé autour de la composante cube {001}<100> que celle prévue par la simulation Monte Carlo.
- Le modèle décrit bien la décroissance de l'intensité de la fibre α, mais prévoit une intensité de la fibre γ plus intense que celle mesurée expérimentalement.



5 % de recristallisation : apparition des premiers germes dans les grains γ , avec une orientation γ .

35 % de recristallisation : développement des germes par consommation des grains γ .

83 % de recristallisation: persistance de grains α déformés.

Simulation Monte Carlo : recristallisation de l'agrégat déformé en compression plane.

Expérience : orientations de l'axe de compression pour différents taux de recristallisation.

Fig. 15. *Simulation de la restauration/germination/croissance et résultats expérimentaux.*

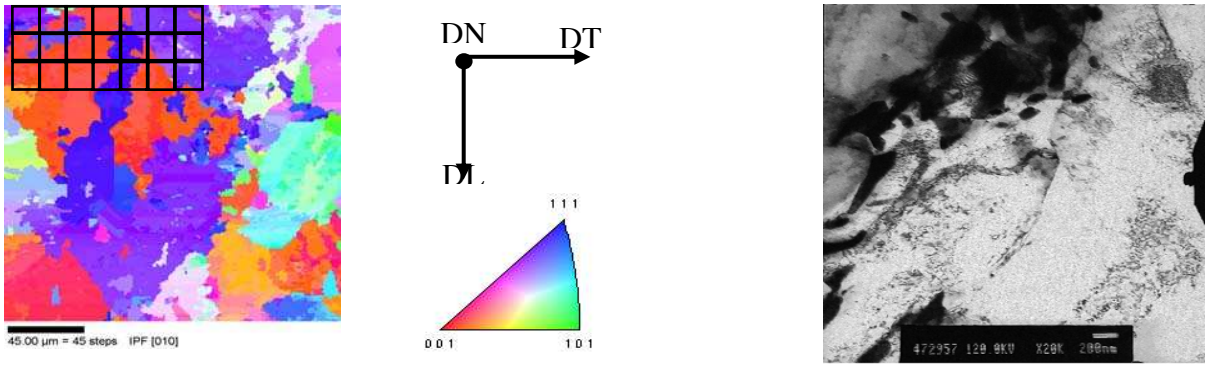
5.3 SIMULATION DE LA RUPTURE EN FOND DE FISSURE DANS LA TRANSITION FRAGILE/DUCTILE. COUPLAGE DÉFORMATION-PROBABILITÉ DE RUPTURE

Les aciers faiblement alliés présentent une transition de comportement à la rupture fragile/ductile. Si T_0 est la température de transition, à basse température $T < T_0$ la ténacité est faible et la rupture s'effectue par clivage. À haute température, $T > T_0$, la ténacité augmente et la rupture est ductile.

Les travaux déjà effectués semblent montrer que les mécanismes à l'origine du déclenchement du clivage, tel l'amorçage sur des défauts critiques, sont influencés par la plasticité et évoluent avec la température. Cette étude montre dans quelle mesure la modification des mécanismes de plasticité avec la température peut affecter le déclenchement du clivage et intervenir dans la transition ductile/fragile du matériau.

L'approche cristalline de Libert [32, 33] est utilisée pour décrire les hétérogénéités des champs mécaniques sur un agrégat situé en fond de fissure en état de triaxialité.

Le matériau étudié est une bainite supérieure obtenue par traitement thermique d'un acier 16MND5. Au cours de la trempe, les grains de la phase mère se subdivisent en un ensemble paquets de lattes d'orientations voisines constituant des paquets d'environ 20 µm comme le montre la cartographie EBSD (figure 16).



Agrégat étudié *Observation au MET*

Fig. 16. *Cartographie des orientations de la normale au plan de l'agrégat bainitique. Observation d'un paquet de lattes en MET.*

Des observations MET ont été réalisées à l'état non déformé. Les lattes de bainite sont faiblement désorientées et l'épaisseur de ces lattes est de l'ordre de 1 µm, ce qui confirme les observations réalisées en MEB et en analyse EBSD. Les carbures mesurent de 300 à 400 nm. Les densités de dislocations ont été calculées sur chacun des clichés MET et sont de l'ordre de $2{,}8.10^{14}$ m^{-2}.

<u>Identification :</u> Les paramètres du matériau ont été identifiés sur des essais de traction monotone à -150 °C, -90 °C, -60 °C et 25 °C, et sur des essais de sauts de vitesse et de sauts de température (à $\dot{\varepsilon} = 5\ 10^{-4}\ s^{-1}$) pour deux valeurs de *T*.

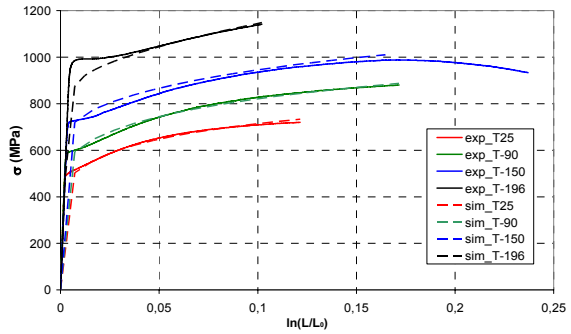
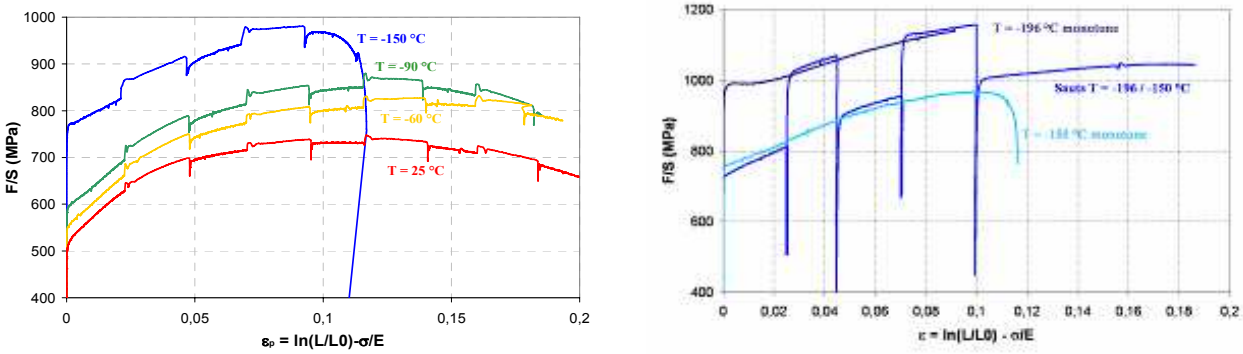


Fig. 17. *Courbes de traction de la bainite à différentes températures. Comparaison des expériences et des simulations.*



(a) (b)

Fig. 18. *Essais sur la bainite : (a) sauts de vitesse à $\dot{\varepsilon} = 5.10^{-4}$ et $5.10^{-3}\ s^{-1}$; (b) sauts de température à $\dot{\varepsilon} = 5.10^{-3}\ s^{-1}$.*

Les valeurs du volume d'activation V^*, calculées d'après les courbes de la figure 18, sont de l'ordre de 10 b^3 à -150 °C. Ces valeurs sont identiques à celles du volume d'activation correspondant au double décrochement. À 25 °C, la forte augmentation de V^* suggère que d'autres mécanismes activés thermiquement, comme le glissement dévié, prennent le relais. L'énergie d'activation ΔG est de l'ordre de 1 eV. Ces mesures ont été utilisées dans le cadre de la modélisation pour fixer le paramètre correspondant à l'énergie libre d'activation ΔG_0.

Tableau 3. *Évolutions de V* et de ΔG en fonction de la température T dans la bainite.*

Température (°C)	25	-60	-90	-150
V* (en b^3)	55	25	20	9
ΔG (en eV)	1,00	-	-	0,41

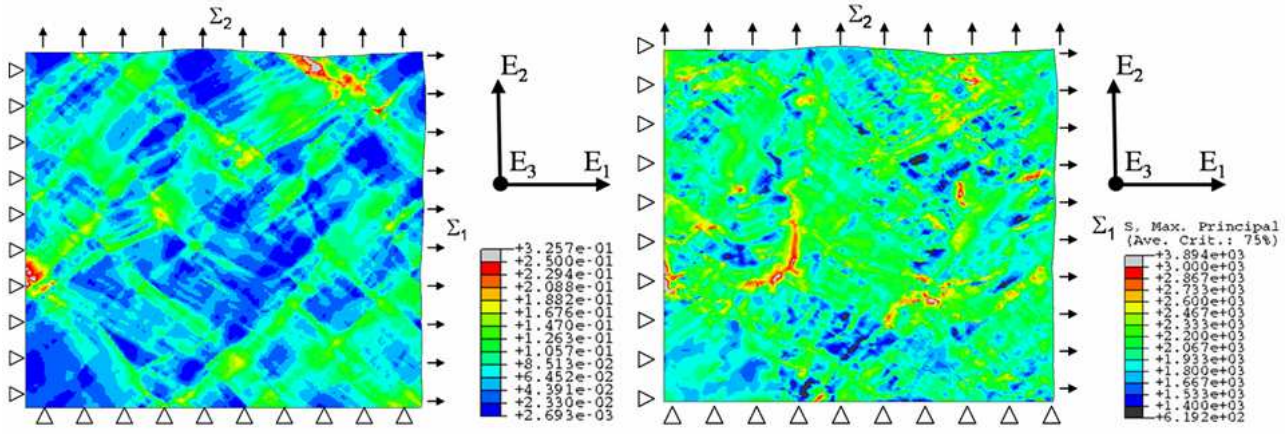
Tableau 4. *Paramètres du modèle identifiés sur les courbes de traction monotone et sur les essais avec sauts de vitesse.*

$\dot{\gamma}_0$ (s^{-1})	ΔG_0 (eV)	τ_R (MPa)	p	q	ρ_0 (MPa)	a^{su}	ρ_0 (m^{-2})
10^6	1,00	498	0,283	1,17	88,9	0,251	10^{14}
ρ_0 (m^{-2})	K (25°C)	K (-90°C)	K (-150°C)	K(-196°C)	y_{c0} (nm)	E_{yc} (eV)	D_{grain} (µm)
10^{14}	35,6	63,8	323,1	449,9	18,6	2,17 10^{-2}	2,5

Simulation des hétérogénéités dans l'agrégat numérique :

Les calculs par éléments finis ont été réalisés avec le code de calcul ABAQUS™. Le maillage de l'agrégat cristallin utilisé comporte 126.000 éléments de type C3D8R et est constitué de 3 couches identiques de 210×200 µm^2 obtenues par trois acquisitions EBSD de la même surface. On rappelle qu'à chaque élément est associée une orientation cristallographique initiale, soit une évolution locale spécifique des glissements plastiques γ^s et des densités de dislocations ρ^s.

Deux niveaux de triaxialité sont ainsi simulés χ = 1,5 ou 2,5. Pour chaque état de triaxialité, trois simulations sont réalisées à -90 °C, -150 °C et -196 °C. Les contraintes sont imposées de sorte à avoir une vitesse de déformation moyenne de l'ordre de $\dot{\varepsilon} = 5.10^{-4}$ s^{-1}. Il est donc possible d'étudier l'évolution des champs locaux et, en particulier, les hétérogénéités de la contrainte principale maximale locale σ_1 en fonction de plusieurs paramètres.



(a) ε_{11} (b) σ_1

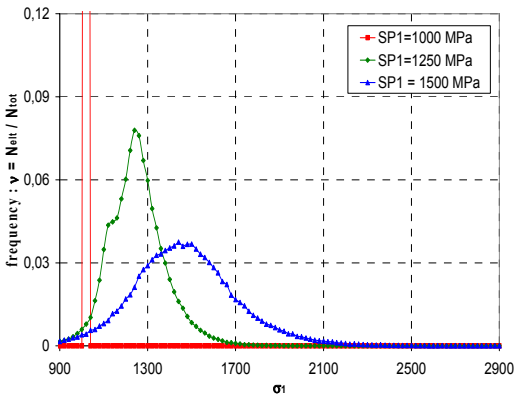
Fig. 19. *Calcul de plasticité cristalline en déformations planes à T = -196 °C et à triaxialité imposée de 1,5 (Σ_1 = 2000 MPa, Σ_2 = 890 MPa, E_{33} = 0). Cartographies (a) de la composante de déformation ε_{11} et (b) de la contrainte principale maximale σ_1.*

Les cartographies de déformation montrent une localisation en bandes dont l'orientation est proche de ±45°. Ces bandes traversent les interfaces entre les paquets de lattes, ce qui a déjà été confirmé expérimentalement. La contrainte principale maximale σ_1 est localisée à l'interface entre certains paquets de lattes ou alors dans les paquets de lattes de plus petite taille. Cependant, ces cartographies ne donnent pas d'information claire sur l'évolution des hétérogénéités.

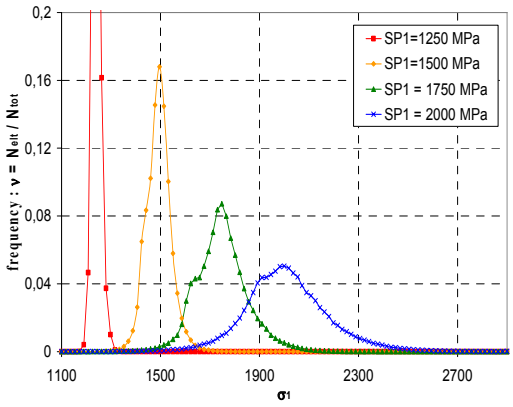
Les histogrammes de distributions de valeurs de σ_1 dans l'agrégat (Fig. 20) fournissent des informations plus précises sur l'évolution qualitative du niveau d'hétérogénéité en fonction de la triaxialité (χ = 1,5 et 2,5), la température, la contrainte principale moyenne $\Sigma_1 = <\sigma_1>$ et le niveau de déformation moyen.

L'étude comparative des distributions de contraintes principales maximales montre que :

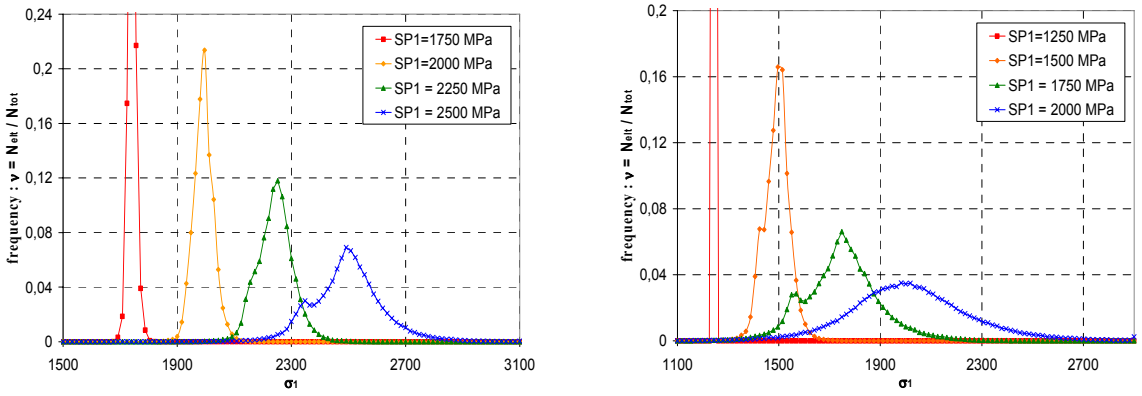
- Les distributions de σ_1 sont de plus en plus hétérogènes au fur et à mesure que la contrainte principale macroscopique $\Sigma_1 = <\sigma_1>$ augmente. Il s'agit d'un effet d'augmentation des hétérogénéités du fait de l'accroissement du chargement et de la déformation moyenne.
- Pour un niveau de triaxialité fixé, les distributions de σ_1 en fonction de la température T sont décalées vers les contraintes élevées et l'allure des distributions est affectée. Le décalage en contrainte s'explique aisément par une augmentation de la limite d'élasticité lorsque T diminue, mais en l'absence de comparaison à déformation moyenne fixée, il est impossible de conclure quant à l'effet de T sur l'allure des distributions.
- La comparaison de deux niveaux de triaxialité χ pour une contrainte moyenne et une température fixées, montre que le niveau d'hétérogénéité a tendance à diminuer lorsque la triaxialité augmente. Cette observation *a priori* surprenante peut s'expliquer par le fait que, à $\Sigma_1 = <\sigma_1>$ fixée, la déformation équivalente moyenne est d'autant plus faible que la triaxialité est élevée.



T = -90 °C et χ = 1,5



T = -90 °C et χ = 2,5



T = -196 °C et χ = 1,5 T = -196 °C et χ = 2,5

Fig. 20. *Histogrammes de distribution de la contrainte principale max.* σ_1 *dans l'agrégat, pour différentes amplitudes de la contrainte principale moyenne* $\Sigma_1 = \langle \sigma_1 \rangle$ *=SP1.*

Afin de quantifier rigoureusement l'effet des différents paramètres sur les distributions de σ_1, qui sont liées aux hétérogénéités des champs mécaniques, celles-ci sont approchées par une fonction mathématique via un ajustement des paramètres de cette fonction. Par la suite, cette quantification des hétérogénéités est utilisée pour trouver une relation liant les paramètres à T, $\Sigma_1 = <\sigma_1>$, χ ou $<\varepsilon_{eq}>$.

Distribution des contraintes :

Dans la théorie de l'approche locale, le seul paramètre relié aux champs mécaniques est la contrainte principale moyenne dans le maillon. Pour prendre en compte l'effet des hétérogénéités locales dans un modèle de ce type, il faut donc faire intervenir une ou plusieurs grandeurs autres que la contrainte principale.

Dans le cadre de la prévision de l'amorçage de la rupture, il est important de bien décrire les valeurs extrêmes de σ_1 dans l'agrégat, puisque la rupture va s'amorcer là où les contraintes locales sont les plus élevées. Nous avons choisi de représenter la distribution des valeurs de σ_1 par une fonction de Gumbel de première espèce. La probabilité cumulée que la contrainte principale σ soit inférieure à une valeur σ_1 s'écrit :

$$P(\sigma < \sigma_1) = 1 - \exp\left[-\exp\left(\frac{\sigma_1 - A}{B}\right)\right] \qquad (78)$$

Où A et B sont deux paramètres qui sont identifiés sur les distributions de σ_1 obtenues numériquement. Pour chaque état de chargement, il est possible de définir $P(\sigma < \sigma_1) > 0{,}9$, c'est-à-dire dans le domaine des queues de distributions, un jeu de paramètres A et B qui satisfait les distributions simulées. L'accord est très bon, sauf pour les valeurs de Σ_1 les moins élevées (Fig. 21). L'évolution des hétérogénéités est donc portée uniquement par B :

$$\Sigma_1 = <\sigma_1> = A - B\,\Gamma' \qquad (79)$$

$\Gamma'(n)$ est la dérivée de la fonction $\Gamma(n)$ et vaut 0,5772 pour $n = 1$.

La figure 21 suggère que le paramètre B dépend linéairement de la contrainte principale moyenne mais cette dépendance linéaire est affectée par T et surtout par la triaxialité qui

modifie sensiblement la pente de la dépendance linéaire. Il ne semble *a priori* pas évident de ne faire dépendre le paramètre *B* que de la contrainte principale, puisque cette approche nécessiterait de comprendre précisément le rôle joué par la triaxialité. Toutefois, ce premier traitement statistique montre clairement qu'il n'est pas possible de formuler un critère d'évolution des hétérogénéités portant uniquement sur la contrainte principale macroscopique, qui est la seule variable prise en compte dans l'approche locale classique de la rupture.

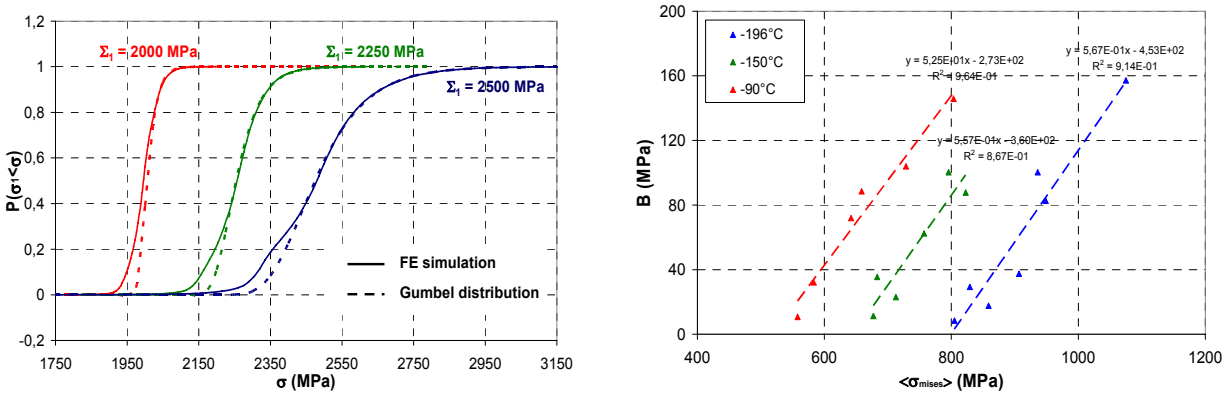


Fig. 21. *Identification de la distribution de Gumbel sur les hétérogénéités de* σ_1 *simulées (T = -196 °C,* χ *= 2,5) et évolution de B en fonction de T,* $<\sigma_{mises}>$ *et* χ *.*

Vers une approche locale de la rupture tenant compte des hétérogénéités plastiques et de la distribution de la taille des carbures

Le critère de Griffith associe la contrainte critique d'amorçage du clivage à la taille r_c d'un carbure :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{\pi E A_s}{2(1-\nu^2)r_c}} \tag{80}$$

où E est le module de Young du matériau et A_s son énergie de surface libre.

La probabilité d'amorçage du clivage sur un défaut de taille r_c peut s'écrire :

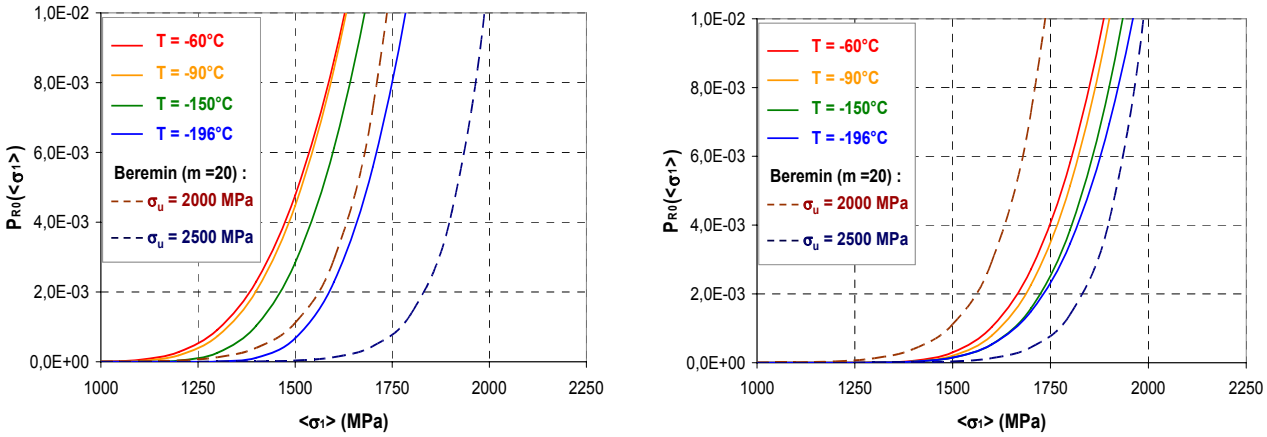
$$P_{R0} = \int_{a/2}^{\infty} f(r_c) P(\sigma_1 > \sigma_c) dr_c \tag{81}$$

$f(r_c)$ est la densité de probabilité de distribution de tailles de défauts [45] dont les paramètres ont été identifiés sur les aciers de cuve bainitiques A508 C13.
Cette relation permet de calculer la probabilité de rupture dans un volume élémentaire V_0 supposé égal à celui de l'agrégat.

La comparaison avec le modèle de Beremin [46] qui suppose la contrainte homogène dans l'agrégat et qui est indépendant de la température est donnée sur la figure 22.

Ce modèle donne des dispersions de contraintes à rupture du même ordre que celles prédites par le modèle de Beremin, y compris aux températures les plus basses. Par ailleurs, ce modèle permet de rendre compte de l'effet de la température, de la triaxialité et de la déformation sur l'évolution de la probabilité de rupture P_{R0}. À déformation fixée, la probabilité de rupture est une fonction décroissante de la température et croissante avec la triaxialité. L'effet de la déformation est d'autant plus marqué que la température est élevée.
Plus généralement, ce type d'approche permet d'introduire une dépendance de la probabilité de rupture en température et en triaxialité fondée uniquement sur la description locale du

comportement. Il s'agit d'un des intérêts majeurs de ce type de modèle par rapport à des approches locales « classiques » en mécanique de la rupture.



(a) Triaxialité $\chi = 1,5$ (b) Triaxialité $\chi = 2,5$

Fig. 22. *Courbes $P_{R0} = f(<\sigma_1>)$ pour différentes valeurs de la température T et comparaison avec le modèle de Beremin pour (a) $\chi = 1,5$ et (b) $\chi = 2,5$.*

6 CONCLUSION

Plusieurs exemples de modélisation des champs mécaniques locaux et de couplage avec la recristallisation et l'endommagement-rupture montrent l'intérêt de ce type de simulation pour prévoir des évolutions de texture à chaud après laminage ou de l'endommagement en fond de fissure.

La durée d'un calcul dépend du nombre d'éléments du maillage. Les conditions aux limites sont extrêmement importantes et il est souvent préférable d'appliquer des champs de déformations ou de contraintes périodiques déterminés au préalable par un calcul de structure. Les méthodes présentées ne prennent pas en compte de longueur d'échelle intrinsèque. Par conséquent, il faut que le maillage soit déterminé par la taille du grain pour avoir une précision suffisante. L'inconvénient de ce type d'approche est le nombre de paramètres du matériau qu'il faut identifier sur des essais mécaniques. Il existe plusieurs combinaisons de paramètres pouvant donner la même solution. Il est donc important de déterminer physiquement leur ordre de grandeur. Ces modèles peuvent rendre compte du comportement macroscopique et des surfaces de charge, mais compte tenu des durées de calcul, il peut être préférable d'utiliser des modèles du type auto-cohérent. De nouveaux modèles prenant en compte la courbure du réseau cristallin et par ce biais, introduisant une longueur d'échelle caractéristique du matériau ont été proposés par différents auteurs [47, 48, 49, 50]. Ces modèles, dits non locaux, introduisent de nouveaux paramètres dont la signification physique n'est pas encore claire et augmentent fortement les durées de calcul. Ces modèles, peu dépendant du maillage et décrivant les effets de taille de grains sur la limite d'élasticité et sur les pentes d'écrouissage, sont encore en cours de développement.

RÉFÉRENCES

1. D. Peirce, R.J. Asaro et A. Needleman, Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids, Acta Metall. 31, pp. 1951-1976, (1983).
2. N. Osipov, Génération de microstructures bainitiques, Ph.D École des Mines de Paris (2007).
3. F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin et G. Cailletaud, Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model, Int. J. Plast. 17, n°4, pp. 513–536 (2001).
4. F. Barbe, S. Forest et G. Cailletaud, Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: Results, Int. J. Plast. 17, n°4, pp. 537–563 (2001).
5. P. Erieau, C. Rey, Modelling of deformation and rotation bands and of deformation induced grain boundaries in IF steel aggregate during large plane strain compression, Int. J. Plast. 20, pp. 1763-1788 (2004).
6. P. Erieau, Étude expérimentale et analyse numérique de l'influence des hétérogénéités induites par la déformation à froid sur la recristallisation primaire d'un acier IF-Ti. Thèse de l'École Centrale Paris (2003).
7. D. Cedat, C. Rey, M. Clavel, J.H. Schmitt, M.Le-Flem, O. Fandeur, Experimental characterization and mechanical behaviour modelling of MoTiC composite for high temperature applications, ICSHM, 9th International Conference on the science of hard materials, Montego Bay, Jamaïque 10-14 mars 2008.
8. J. Delfosse, C. Rey, N. Spath, Polycristalline modelling of forging in β phase field of Ti 17, Titanium 2003, juillet 2003, Hambourg, Vol III, pp. 1315-1322.
9. G.I. Taylor, Plastic strains in metals, Journal of the Institute of Metals 62, pp. 307-324 (1938)
10. U.F. Kocks, Laws for work-hardening and low-temperature creep. J. Eng. Mat. Tech., January, pp. 76–85 (1976).
11. R. Madec, B. Devincre, L. Kubin, Simulation of dislocation patterns in multislip, Scripta Mater. 47, pp. 689-695 (2002).
12. A. Bhattacharyya, E. El-Danaf, S. Kalidindi, R. Doherty, Evolution of grain scale microstructure during large strain simple compression of polycrystalline aluminium with quasi-columnar grains: OIM measurements and numerical simulations, Int. J. Plast. 17, pp. 861–883 (2001).
13. H. Mecking, U.F. Kocks, Kinetics of flow and strain hardening. Acta Metall., vol. 29, pp. 1865-1875 (1981).
14. C. Teodosiu, J.L. Raphanel et L. Tabourot, Finite implementation of the large elastoplastic deformation of multicrystals, Large Plastic Deformation, Proc. Int. Seminar MECAMAT'91, Ed. C. Teodosiu, J.L. Raphanel et F. Sidoroff, pp. 153-168, (1991).
15. L. Tabourot, M. Fivel, E. Rauch, Generalised constitutive laws for f.c.c single crystals, Mat. Sci. Engng. A, vol 234, pp. 639-642 (1997).
16. P. Franciosi, Glide mechanisms in B.C.C. crystals: an investigation of the case of α-iron through multislip and latent hardening tests, Acta Metall., vol. 31, n°9, pp. 1331–1342 (1983).
17. U. Essman et H. Mughrabi, Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocations densities, Phil. Mag., Vol. A40, n°6, pp. 731-756 (1979).
18. H. Mughrabi, Dislocation clustering and long-range stresses in monotonically and cyclically metal crystals, Revue Phys. Appl., vol. 23, pp. 367-379 (1988).
19. X. Feaugas, On the origin of the flow stress in stainless steel AISI 316L at 300 K: back stress and effective stress, Acta Mater., vol. 47, pp. 3617-3639 (1999).
20. A. Saai, Modèle physique de la plasticité d'un cristal métallique CFC soumis à des chargements alternés : contribution à la définition d'une modélisation multiéchelle de la mise en forme des métaux, Ph.D. Université de Savoie (2007).
21. G. Cailletaud, Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux, Thèse de l'Université Paris 6 (1987).
22. J. Lemaitre, J.L. Chaboche, Mécanique des matériaux solides, Ed. Dunod (1985).
23. J. Mandel, Une généralisation de la théorie de la plasticité de H.T. Koiter, International Journal of Solids and Structures, vol. 1, pp. 273-295 (1965).
24. F. Kroupa, Phys. Stat. Sol., vol. 3, K391 (1963).

25. J. Friedel, Dislocations. Pergamon Press, 1964.
26. F. Louchet, L. P. Kubin, D. Vesely, Description of low-temperature interstitial hardening of the b.c.c. lattice from in situ experiments, Phil. Mag. A, Vol. 38, pp. 205-221 (1978).
27. L. Stainier, A. M. Cuitiño et M. Ortiz, A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in bcc single crystals, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 50, pp. 1511-1545 (2002).
28. U.F. Kocks, Laws for work hardening and low-temperature creep, J. Eng. Mat. Tech., pp 76-85, (1976).
29. E. Rauch, Étude de l'écrouissage des métaux. Aspects microstructuraux et lois de comportement, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.
30. Y. Nakada, A. S. Keh, Latent hardening in iron single crystals, Acta Metall., Vol. 14, Issue 8, pp. 961-973 (1966).
31. W. A. Spitzig et A. S. Keh, Orientation dependence of the strain-rate sensitivity and thermally activated flow in iron single crystals, Acta metallurgica, Vol. 18, pp 1021-1033 (1970).
32. M. Libert, C. Rey, B. Marini, Simulation des champs mécaniques locaux. Applications à la transition ductile/fragile dans les aciers faiblement alliés.1er Colloque 3M, Interfaces : de l'atome au polycristal, CEA Saclay/INSTN, 14 et 15 juin 2006.
33. M. Libert, Études expérimentales et numériques de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés, Ph.D. École Centrale Paris (2007).
34. E. H. Lee, Elastic-plastic deformation at finite strains, Journal of Applied Mechanics, vol. n°36, pp. 1-6, 1969.
35. S. Forest, Lois de comportement inélastiques en transformations finies, Rapport technique, Cours de DEA Mécanique et Matériaux (1999).
36. J. Delfosse, Étude du forgeage du Ti17 en vue d'améliorer les propriétés en fatigue, Ph.D École Centrale Paris (2005).
37. K. Le Biavant, S. Pommier, C. Prioul, Local texture and fatigue crack initiation in a Ti-6Al-4V titanium alloy. Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, vol. 25, pp. 527-545 (2002).
38. P. Erieau, C. Rey, Finite Element modeling of the intragranular reorientation and stored energy induced by deformation in an IF-Ti Steel aggregate submitted to channel die compression, Material Science Forum, vols. 408-412, pp. 389-394 (2002), Textures of Materials, ICOTOM 13.
39. T. Baudin, A. L. Etter, P. Gerber, A. Samet, R. Penelle, C. Rey, Influence of thermo-mechanical treatments on the stored energy simulated by FEM for two low carbon steels, ICOTOM 14: Textures of Materials, pts 1 and 2, 495-497: 1291-1296 Part 1&2 2005, Materials Science Forum.
40. P. Volovitch, F. Caleyo, T. Baudin, P. Gerber, R. Penelle, C. Rey, Monte Carlo modeling of low carbon steel recrystallization: Role of thermo-mechanical treatment and chemical composition, ICOTOM 14 : Textures of Materials, pts 1 and 2, 495-497: 507-512 part 1&2 2005, Materials Science Forum.
41. D. Solas, C. N. Tomé, Texture and strain localization prediction using a N-site polycrystal model, International Journal of Plasticity, Vol. 17, Issue 5, pp. 737-753 (2001).
42. D. Solas, C. N. Tomé, O. Engler, H. R. Wenk, Deformation and recrystallization of hexagonal metals: modeling and experimental results for zinc, Acta Met., Vol. 49, 18, pp. 3791-3801 (2001).
43. N. Rajmohan, J.A. Szpunar, A new model for recrystallization of heavily cold-rolled aluminium using stored energy, Acta Met., Vol. 49, 18, pp. 3791-3801 (2001)
44. F. J. Humphrey et M. Hatherly, Recrystallisation and related annealing phenomena, Pergamon Press, 1996.
45. S. Lee, S. Kim, B. Hwang, B. S. Lee, C. G. Lee, Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of in SA 508 steel, , Vol. 50, pp. 4755-4762, (2002).
46. F. M. Beremin, A local criterion for cleavage fracture for a nuclear pressure vessel steel. Metallurgical Transactions A, Vol. 14, pp. 2277-2287, (1983).

47. A. Beaudoin, A. Acharya, S.R. Chen, D. A. Korzekwa, M. G. Stout, Consideration of grain size effect and kinetics in the plastic deformation of metal polycrystals, Vol. 48, pp. 3409-3423 (2000).
48. F. T. Meissonier, E. P. Busso, N. P. O'Dowd, Finite element implementation of a generalised non-local rate dependent crystallographic formulation for finite strains, International Journal of Plasticity, vol. 17, pp 601-640 (2001).
49. A. Acharya, J. L. Bassani, A. Beaudoin, Geometrically necessary dislocations hardening and a simple gradient theory of crystal plasticity, Scripta Materiala, vol. 48, pp. 167-172 (2003).
50. A. Ma, F. Roters, D. Raabe, A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations, Acta Met., vol. 54, pp. 2169-2179 (2006).