



**HAL**  
open science

# Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes transformations

Laurent Tabourot

► **To cite this version:**

Laurent Tabourot. Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes transformations. Mécanique [physics.med-ph]. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 1992. Français. NNT: . tel-00177810

**HAL Id: tel-00177810**

**<https://theses.hal.science/tel-00177810>**

Submitted on 9 Oct 2007

**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.

# THESE

Présentée par

**Laurent TABOUROT**  
(Agrégré de Génie Mécanique  
de l' E.N.S. Cachan)

Pour obtenir le titre de

**DOCTEUR**  
de l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE  
arrêté ministériel du 23 novembre 1988

(Spécialité Mécanique)

=====

## LOI DE COMPORTEMENT ELASTOVISCOPLASTIQUE DU MONOCRISTAL EN GRANDES TRANSFORMATIONS

=====

Date de soutenance : 3 février 1992

Composition du jury	F. SIDOROFF	Président
	B. BAUDELET P. FRANCIOSI	Rapporteurs
	E. RAUCH C. TEODOSIU	Examineurs

Thèse préparée au sein du laboratoire de Génie Physique et Mécanique des Matériaux  
GPM2 (Unité de recherche associée au CNRS n° 793)



# Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes transformations

## RESUME

Le but principal de ce travail est l'obtention d'une loi de comportement plastique à grands taux de déformation des monocristaux métalliques à structures cubiques en accord avec les résultats expérimentaux sélectionnés dans la littérature et suffisamment maniable pour être utilisable dans un code de simulation des monocristaux et/ou dans des modèles de passage micro-macro.

Le comportement est décrit par des relations simples mais dans lesquelles les principaux mécanismes physiques intervenant lors de la déformation du monocristal par mouvement de dislocations sont inclus : interaction entre les dislocations de différents systèmes, génération-annihilation des dislocations, seuil d'écoulement des dislocations et viscosité du matériau.

Une identification de ce modèle est faite pour le cuivre en utilisant des résultats caractéristiques extraits de la littérature.

Pour intégrer ces relations, un programme informatique utilisant la méthode des éléments finis en trois dimensions a été spécialement conçu pour la simulation des agrégats de monocristaux. Les résultats de simulations d'essais de traction dans différentes conditions (géométrie de l'éprouvette, orientation cristalline...) sont en bon accord qualitatif avec les résultats expérimentaux (rotation du réseau, nombre et qualité des systèmes actifs, glissements accumulés) prouvant que le modèle proposé est adapté à la description du comportement plastique des monocristaux.

A l'aide du programme, l'influence des paramètres physiques du modèle sur le comportement du monocristal est également analysée.



## ABSTRACT

The main goal of this work is to obtain a constitutive plastic law at large strains for metallic f.c.c. and b.c.c. single crystals in agreement with selected experimental results from literature and simple enough to be put into a finite element simulation code and/or into a micro-macro model.

The behaviour is given by elementary relations but the main physical aspects of single crystal deformation accommodated by glide of dislocations are included : interaction between dislocations of different systems, production-annihilation of dislocations, critical resolved shear stress for activation of dislocation and viscosity of material.

An identification of the model is carried out for copper using typical results from literature.

In order to integrate these relations, a 3-D finite element code has been developed. The results of simulations applied to tensile tests compare favorably with experimental evidence regarding the lattice rotation, the activity of the glide systems and the accumulated glides showing the fitting of the model for the description of plastic behavior of single crystals.

The code is also used to analyse the influence of model's parameters on the response of the material.





INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE  
46, AVENUE FELIX VIALLET 38031 GRENOBLE CEDEX  
TEL : 76.57.45.00

PRESIDENT DE L'INSTITUT  
MONSIEUR G. LESPINARD

ANNEE 1990-1991

PROFESSEURS DES UNIVERSITES

- |            |             |               |
|------------|-------------|---------------|
| ENSERG     | BARIBAUD    | MICHEL        |
| ENSIEG     | BARRAUD     | ALAIN         |
| ENSPG      | BAUDELET    | BERNARD       |
| UFR PGP    | BAUDIN      | GERARD        |
| ENSIEG ILL | BEAUFILS    | JEAN-PIERRE   |
| ENSERG     | BLIMAN      | SAMUEL        |
| ENSHMG     | BOIS        | PHILIPPE      |
| ENSPG      | BONNET      | GUY           |
| ENSEEG     | BONNETAIN   | LUCIEN        |
| ENSIEG     | BRISSONNEAU | PIERRE        |
| CUEFA      | BRUNET      | YVES          |
| ENSHMG     | CAILLERIE   | DENIS         |
| ENSPG      | CAVAIGNAC   | JEAN-FRANCOIS |
| ENSPG      | CHARTIER    | GERMAIN       |
| ENSERG     | CHENEVIER   | PIERRE        |
| UFR PGP    | CHERADAME   | HERVE         |
| ENSIEG     | CHERUY      | ARLETTE       |
| ENSERG     | CHOVET      | ALAIN         |
| ENSHMG     | COGNET      | GERARD        |
| ENSEEG     | COLINET     | CATHERINE     |
| ENSIEG     | CORNUT      | BRUNO         |
| ENSIEG     | COULOMB     | JEAN-LOUIS    |
| ENSIMAG    | CROWLEY     | JAMES         |
| ENSEEG     | DALARD      | FRANCIS       |
| ENSHMG     | DARVE       | FELIX         |
| ENSIMAG    | DELLA DORA  | JEAN          |
| ENSERG     | DEPEY       | MAURICE       |
| ENSPG      | DEPORTES    | JACQUES       |
| ENSEEG     | DEROO       | DANIEL        |
| ENSEEG     | DESRE       | PIERRE        |
| ENSEEG     | DIARD       | JEAN-PAUL     |
| ENSERG     | DOLMAZON    | JEAN-MARC     |
| ENSEEG     | DURAND      | FRANCIS       |
| ENSPG      | DURAND      | JEAN-LOUIS    |
| ENSHMG     | FAUTRELLE   | YVES          |
| ENSIEG     | FOGGIA      | ALBERT        |
| ENSIMAG    | FONLUPT     | JEAN          |
| ENSIEG     | FOULARD     | CLAUDE        |
| ENSEEG     | GALERIE     | ALAIN         |



UFR PGP	GANDINI	ALESSANDRO
ENSPG	GAUBERT	CLAUDE
ENSERG	GENTIL	PIERRE
ENSIEG	GENTIL	SYLVIANE
ENSERG	GUERIN	BERNARD
ENSEEG	GUYOT	PIERRE
ENSIEG	IVANES	MARCEL
ENSERG	JANOT	MARIE-THERESE
ENSIEG	JAUSSAUD	PIERRE
ENSPG	JOST	REMY
ENSPG	JOUBERT	JEAN-CLAUDE
ENSIEG	JOURDAIN	GENVIEVE
UFR PGP	LACHENAL	DOMINIQUE
ENISEG	LACOUME	JEAN-LOUIS
ENSIEG	LADET	PIERRE
ENSIEG	LIENARD	JOEL
ENSHMG	LESIEUR	MARCEL
ENSHMG	LESPINARD	GEORGES
ENSPG	LONGUEQUEUE	JEAN-PIERRE
ENSHMG	LORET	BENJAMIN
ENSEEG	LOUCHET	FRANCOIS
ENSEEG	LUCAZEAU	GUY
ENSIMAG	LUX	AUGUSTIN
ENSIEG	MASSE	PHILIPPE
ENSIEG	MASSELOT	CHRISTIAN
ENSIMAG	MAZARE	GUY
ENSIMAG	MOHR	ROGER
ENSHMG	MOREAU	RENE
ENSIEG	MORET	ROGER
ENSIMAG	MOSSIERE	JACQUES
ENSHMG	OBLED	CHARLES
ENSERG	PANANAKAKIS	GEORGES
ENSEEG	PAULEAU	YVES
ENSIEG	PERRET	ROBERT
ENSHMG	PIAU	JEAN-MICHEL
ENSERG	PIC	ETIENNE
ENSIMAG	PLATEAU	BRIGITTE
ENSERG	POUPOT	CHRISTIAN
ENSEEG	RAMEAU	JEAN-JACQUES
ENSPG	REINISCH	RAYMOND
UFR PGP	RENAUD	MAURICE
ENSIMAG	ROBERT	FRANCOIS
ENSIEG	ROYE	DANIEL
ENSIEG	SABONNADIERE	JEAN-CLAUDE
ENSERG	SAGUET	PIERRE
ENSIMAG	SAUCIER	GABRIELE
ENSPG	SCHLENKER	CLAIRE
ENSPG	SCHLENKER	MICHEL
UFR PGP	SILVY	JACQUES
ENSHMG	SIRIEYS	PIERRE
ENSEEG	SOHM	JEAN-CLAUDE
ENSIMAG	SOLER	JEAN-LOUIS
ENSEEG	SOUQUET	JEAN-LOUIS
ENSHMG	TICKIEWITCH	SERGE
ENSHMG	TROMPETTE	PHILIPPE
ENSIMAG	VERJUS	JEAN-PIERRE
ENSPG	VINCENT	HENRI
ENSERG	ZADWORNY	FRANCOIS

SITUATION PARTICULIERE
PROFESSEURS D'UNIVERSITE

DETACHEMENT

ENSPG	BLOCH	DANIEL.....	RECTEUR	21.12.1993
ENSIMAG	LATOMBE	J.CLAUDE.....	DETACHEMENT	01.05.1993
ENSHMG	PIERRARD	J.MARIE.....	DETACHEMENT	01.05.1991
ENSIMAG	VEILLON	GERARD.....	DISPONIBLE	01.10.1993

SURNOMBRE

ENSHMG	BOUVARD	MAURICE .....		30.09.1990
--------	---------	---------------	--	------------

PERSONNES AYANT OBTENU LE DIPLOME

D'HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

BALESTRA  
BALME  
BECKER  
BIGEON  
BINDER  
BOE  
BOUVIER  
CHASSERY  
CHOLLET  
COEY  
COMMAULT  
CORNUEJOLS  
COURNIL  
DALLERY  
DESCOTES-GENON  
DUGARD  
DURAND  
FERRIEUX  
GAUTHIER  
GHIBAUDO  
HAMAR  
HAMAR  
HORAUD  
KUENY  
LATOMBE  
LE HUY  
LE GORREC  
LOZANO-LEAL  
MAHEY  
MEUNIER  
MICHEL  
MONMUSSON-PICQ  
MULLER  
MULLER  
NGUYEN TRONG  
NIEZ  
PASTUREL  
PERRIER  
PLA  
RECHENMANN  
ROGNON  
ROUGER  
TCHUENT  
TRYSTRAM

FRANCIS  
LOUIS  
MONIQUE  
JEAN  
ZDENECK  
LOUIS-JEAN  
GERARD  
JEAN-MARC  
JEAN-PIERRE  
JEAN-PIERRE  
CHRISTIAN  
GERARD  
MICHEL  
YVES  
BERNARD  
LUC  
MADELEINE  
JEAN-PAUL  
JEAN-PAUL  
GERARD  
SYLVIANE  
ROGER  
PATRICE  
JEAN-LOUIS  
CLAUDINE  
HOANG  
BERNARD  
ROGELIO  
PHILIPPE  
GERARD  
GERARD  
GEORGETTE  
JEAN  
JEAN-MICHEL  
BERNADETTE  
JEAN-JACQUES  
ALAIN  
PASCAL  
FERNAND  
FRANCOIS  
JEAN-PIERRE  
JEAN  
MAURICE  
DENIS

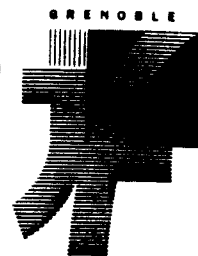
DIRECTEURS DE RECHERCHE DU CNRS
---------------------------------

ALEMANY  
 ALLIBERT  
 ALLIBERT  
 ANSARA  
 ARMAND  
 AUDIER  
 BERNARD  
 BINDER  
 BONNET  
 BORNARD  
 CAILLET  
 CARRE  
 CHATILLON  
 CLERMONT  
 COURTOIS  
 CRISTOLOVEANU  
 DAVID  
 DION  
 DRIOLE  
 DURAND  
 EUSCUDIER  
 EUSTATHOPOULOS  
 FINON  
 FRUCHARD  
 GARNIER  
 GIROD  
 GLANGEAUD  
 GUELIN  
 HOPFINGER  
 JORRAND  
 JOUD  
 KAMARINOS  
 KLEITZ  
 KOFMAN  
 LANDAU  
 LEJEUNE  
 LEPROVOST  
 MADAR  
 MARTIN  
 MERMET  
 MICHEL  
 NAYROLLES  
 PASTUREL  
 PEUZIN  
 PHAM  
 PIAU  
 RENOUARD  
 SENATEUR  
 SIFAKIS  
 SIMON

ANTOINE  
 COLETTE  
 MICHEL  
 IBRAHIM  
 MICHEL  
 MARC  
 CLAUDE  
 GILBERT  
 ROLAND  
 GUY  
 MARCEL  
 RENE  
 CHRISTIAN  
 JEAN-ROBERT  
 BERNARD  
 SORIN  
 RENE  
 JEAN-MICHEL  
 JEAN  
 ROBERT  
 PIERRE  
 NICOLAS  
 DOMINIQUE  
 ROBERT  
 MARCEL  
 JACQUES  
 FRANCOIS  
 PIERRE  
 EMIL  
 PHILIPPE  
 JEAN-CHARLES  
 GEORGES  
 MICHEL  
 WALTER  
 IOAN  
 GERARD  
 CHRISTIAN  
 ROLAND  
 JEAN-MARIE  
 JEAN  
 JEAN-MARIE  
 BERNARD  
 ALAIN  
 JEAN-CLAUDE  
 ANTOINE  
 MONIQUE  
 DOMINIQUE  
 JEAN-PIERRE  
 JOSEPH  
 JEAN-PAUL

SUERY  
 TEODOSIU  
 VACHAUD  
 VAUCLIN  
 WACK  
 YAVARI  
 YONNET

MICHEL  
 CHRISTIAN  
 GEORGES  
 MICHEL  
 BERNARD  
 ALI-REZA  
 JEAN-PAUL



Président de l'Université :

M. NEMOZ Alain

ANNEE UNIVERSITAIRE 1990 - 1991

MEMBRES DU CORPS ENSEIGNANT DE SCIENCES ET DE GEOGRAPHIE

PROFESSEURS DE 1ERE CLASSE

ADIBA Michel	Informatique
ANTOINE Pierre	Géologie I.R.I.G.M.
ARVIEU Robert	Physique Nucléaire I.S.N.
AURIAULT Jean Louis	Mécanique
BARNA Jean René	Statistiques - Mathématiques Appliquées
BECKER Pierre	Physique
BEGUIN Claude	Chimie Organique
BELORISKY Elie	Physique
BENZAKEN Claude	Mathématiques Pures
BERARD Pierre	Mathématiques Pures
BERNARD Alain	Mathématiques Pures
BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques Pures
BERTRANDIAS Jean Paul	Mathématiques Pures
BILLET Jean	Géographie
BLANCHI Jean Pierre	A.P.S.
BOEHLER Jean Paul	Mécanique
BOITET Christian	Informatique et Mathématiques Appliquées
BORNAREL Jean	
BRUANDET Jean François	Physique
CARLIER Georges	Biologie Végétale
CASTAING Bernard	Physique
CHARDON Michel	Géographie
CHIBON Pierre	Biologie Animale
COHEN ADDAD Jean Pierre	Physique
COLIN DE VERDIERE Yves	Mathématiques Pures
CYROT Michel	Physique du Solide
DEBELMAS Jacques	Géologie Générale
DEMAILLY Jean Pierre	Mathématiques Pures
DENEUVILLE Alain	Physique
DEPORTES Charles	Chimie Minérale
DOLIQUE Jean Michel	Physique des Plasmas
DOUCE Roland	Physiologie Végétale
DUCROS Pierre	Cristallographie
FINKE Gerde	Informatique
GAUTRON René	Chimie
GENIES Eugène	Chimie
GERMAIN Jean Pierre	Mécanique
GIDON Maurice	Géologie
GIGNOUX Claude	Sciences nucléaires
GILLARD Roland	Mathématiques
GUITTON Jacques	Chimie

.. / ...

HERAULT Jeanny	Physique
HICTER Pierre	Chimie
JANIN Bernard	Géographie
JOLY Jean René	Mathématiques Pures
JOSELEAU Jean Paul	Biochimie
KAHANE André	Physique
KAHANE Josette	Physique
KRAKOWIAK Sacha	Mathématiques Appliquées
LAJZEROWICZ Jeanine	Physique
LAJZEROWICZ Joseph	Physique
LAURENT Pierre Jean	Mathématiques Appliquées
LEBRETON Alain	Mathématiques Appliquées
DE LEIRIS Joël	Biologie
LHOMME Jean	Chimie
LOISEAUX Jean Marie	Sciences Nucléaires I.S.N.
LONGEQUEUE Nicole	Physique
LUNA Domingo	Mathématiques Pures
MACHE Régis	Physiologie Végétale
MASCLE Georges	Géologie
MAYNARD Roger	Physique du Solide
NEMOZ Alain	Physique
OMONT Alain	Astrophysique
PELMONT Jean	Biochimie
PERRIER Guy	Géophysique
PIERRE Jean Louis	Chimie Organique
RENARD Michel	Thermodynamique
RICHARD Jean Marc	
RIEDTMANN Christine	Mathématiques
RINAUDO Marguerite	Chimie C.E.R.M.A.V.
ROBERT Jean Bernard	
ROSSI André	Biologie
SAXOD Raymond	Biologie Animale
SENGEL Philippe	Biologie Animale
SERGERAERT Francis	Mathématiques Pures
SOUCHIER Bernard	Biologie
STUTZ Pierre	Mécanique
TRILLING Laurent	Mathématiques Appliquées
VALLADE Marcel	Physique
VAN CUTSEM Bernard	Mathématiques Appliquées
VIALON Pierre	Géologie
VIDAL Micheal	

PROFESSEURS DE 2EME CLASSE

APPARU Marcel	Chimie
ARMAND Gilbert	Géographie
ARNAUD Hubert	Géologie
ARTRU Marie Christine	Physique
ATTANE Pierre	Mécanique
BARATE Robert	Sciences Nucléaires
BARET Paul	Chimie
BARGE Jean	Mathématiques
BARLET Roger	Chimie
BERTIN José	Mathématiques
BLOCK Marc	Biologie
BLUM Jacques	Mathématiques Appliquées
BOITET Christian	Mathématiques Appliquées
BORRIONE Dominique	Automatique informatique
BOULON Marc	Mécanique
BOUTRON Claude	Glaciologie
BOUVET Jean	Biologie
BROSSARD Jean	Mathématiques
BRUGAL Gérard	Biologie
CAMPILLO Michel	Géophysique
CAVILLE Jean Yves	Chimie
CERFF Rudiger	Biologie
CHIARAMELLA Yves	Mathématiques Appliquées
CHOLLET Jean Pierre	Mécanique
COLOMBEAU Jean François	Mathématiques (ENSL)
COTTET Georges-Henri	Modélisation, calcul scientifique, statis.
COURT Jean	Chimie
CUNIN Pierre Yves	Informatique
DAVID Jean	Géographie
DEROUARD Jacques	Physique
DHOUILLY Danielle	Biologie
DUFRESNOY Alain	Mathématiques Pures
DUPUY Claude	Chimie
DURAND Mireille	Sciences Nucléaires
FONTECAVE Marc	Chimie
FOURNIER Jean Marc	Physique
GASPARD François	Physique
GIDON Maurice	Géologie
GIORNI Alain	Sciences Nucléaires
GONZALEZ SPRINBERG Gérardo	Mathématiques Pures
GOURC Jean Pierre	Mécanique
GUIGO Maryse	Géographie
GUMUCHIAN Hervé	Géographie
HACQUES Gérard	Mathématiques Appliquées
HAMMOU Abdelkader	Chimie
HERBIN Jacky	Géographie
HERINO Roland	Physique
HERZOG Michel	Biologie
JARDON Pierre	Chimie
JUTTEN Christian	Physique
KERCKHOVE Claude	Géologie
KOSAREW Siegmund	Math. fondamentales et appliquées
KLINGER Jurgen	Glaciologie
LAURENT Christine	Mathématiques
MANDARON Paul	Biologie
MARTINEZ Francis	Mathématiques Appliquées
MERCHEZ Fernand	Physique
MILAS Michel	Chimie
MOREL Alain	Géographie
MORIN Pierre	Physique
NGUYEN HUY Xuong-	Informatique
OUDET Bruno	Mathématiques Appliquées

PAUTOU Guy  
PECHER Arnaud  
PELLETIER Guy  
PERRIN Claude  
PFISTER Claude  
PIBOULE Michel  
PORTESEIL Jean Louis  
PUECH Laurent  
RAYNAUD Hervé  
REGNARD Jean René  
ROBERT Claudine  
ROBERT Danielle  
ROBERT Gilles  
SAJOT Gérard  
SARROT REYNAULD Jean  
SAYETAT Françoise  
SERVE Denis  
STOECKEL Frédéric  
SCHOLL Pierre Claude  
SUBRA Robert  
TEMPERVILLE André  
TISSUT Michel  
TOURNIER Evelyne  
VALLADE Marcel  
VALLON Michel  
VICAT Jean  
VINCENS Maurice  
VINCENT Gilbert  
VIVIAN Robert  
VOTTERO Philippe  
WITOMSKI Patrick

Biologie  
Géologie  
Astrophysique  
Sciences Nucléaires I.S.N.  
Biologie  
Géologie  
Physique  
Physique  
Mathématiques Appliquées  
Physique  
Didactique des disciplines scientifiques  
Chimie  
Mathématiques Pures  
Physique  
Géologie  
Physique  
Chimie  
Physique  
Mathématiques Appliquées  
Chimie  
Mécanique  
Biologie  
Informatique et Mathématiques appliquées  
Physique  
Glaciologie  
Physique  
Chimie  
Physique  
Géographie  
Chimie





A mes parents

A mes enfants



## Remerciements

Je remercie le professeur Bernard Baudalet de m'avoir accueilli au laboratoire de Génie Physique et Mécanique des Matériaux de Grenoble au sein duquel j'ai pu m'épanouir tant sur le plan professionnel que personnel. Ces remerciements s'adressent aussi au nouveau directeur du laboratoire, le docteur Michel Suery, qui a continué à me faire confiance.

J'exprime également toute ma gratitude au professeur Bernard Baudalet pour les discussions que nous avons eues concernant le contenu de ce rapport, me permettant ainsi d'en améliorer la qualité, et pour sa présence en tant que rapporteur dans le jury d'examen de cette thèse.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance et toute ma gratitude à mes directeurs de thèse, les docteurs Cristian Teodosiu et Edgar Rauch pour m'avoir dirigé tout au long de ce travail et fait bénéficier de leurs très grandes compétences scientifiques.

Une fructueuse coopération s'est établie avec le laboratoire PMTM de Villeteuse à Paris Nord pendant la durée de cette thèse. Merci au docteur Jean Raphanel pour ces échanges qui, souhaitons le, continueront dans le futur.

Je remercie le professeur Michael Ortiz de l'université Brown (Etats-Unis) de s'être intéressé à mes travaux et de m'avoir fait bénéficier de la primeure de certains de ses résultats.

Mes remerciements s'adressent également au professeur François Sidoroff qui a accepté la présidence du jury et au docteur Patrick Franciosi qui est l'autre rapporteur de ce travail.

Le déroulement de cette thèse aurait été plus compliqué sans l'aide de Charles Jossier, spécialiste du système Apollo et de tout ce qui a trait à l'informatique. Qu'il trouve ici, l'expression de ma gratitude pour sa patience et sa disponibilité à mon égard.

Un très grand merci à Andrée Tournier pour sa gentillesse et sa bonne humeur toujours égales et sa très grande disponibilité.

Enfin, j'ai une pensée chaleureuse pour tous les amis qui de près ou de loin m'ont épaulé lors de ce travail et dans cette étape de ma vie : Alain Varlotaux, Jean-Jacques Blandin, Thierry Ladreyt, Armelle Philip, Pierre Alart, Luc Lajoie, Remy Dendievel, Josette Mabed et tous les membres de GPM2.

La frappe de cette thèse a été effectuée au moyen du traitement de texte  $\text{\LaTeX}$  que je recommande aux futurs rédacteurs !



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Etude bibliographique</b>	<b>5</b>
1.1 Introduction . . . . .	5
1.2 Physique de la déformation plastique par mouvement de dislocations	6
1.2.1 Introduction . . . . .	6
1.2.2 Mouvement des dislocations . . . . .	6
1.2.3 Cission critique . . . . .	7
1.2.4 Ecrouissage . . . . .	10
1.3 Expériences et résultats caractéristiques sur les monocristaux . . . . .	12
1.3.1 Introduction . . . . .	12
1.3.2 Traction uniaxiale. Les courbes $(\tau, \gamma)$ . . . . .	12
1.3.3 Influence des paramètres sur la courbe $(\tau, \gamma)$ . . . . .	15
1.3.4 Commentaires sur l'essai de traction . . . . .	21
1.3.5 Les essais de durcissement latent . . . . .	21
1.3.6 Autres essais . . . . .	26
1.4 Description de la plasticité du monocristal . . . . .	27
1.4.1 Introduction . . . . .	27
1.4.2 Lois d'écoulement plastique . . . . .	27
1.4.3 Lois d'écrouissage . . . . .	28
1.4.4 Commentaires . . . . .	36
1.5 Solutions de divers problèmes aux limites . . . . .	37
1.5.1 Conditions aux limites de type Taylor . . . . .	38
1.5.2 Conditions aux limites de type Taylor relâché . . . . .	38
1.5.3 Monocristal plan . . . . .	39
1.5.4 Les démarches utilisant la méthode des éléments finis . . . . .	39
<b>2 Modélisation</b>	<b>45</b>
2.1 Rappel de mécanique des milieux continus . . . . .	45
2.1.1 Introduction . . . . .	45
2.1.2 Les équations cinématiques . . . . .	45
2.1.3 Les différents tenseurs des contraintes utilisés . . . . .	46
2.1.4 Les équations d'équilibre et les conditions aux limites . . . . .	47

2.1.5	Le principe des puissances virtuelles . . . . .	49
2.1.6	Commentaires . . . . .	49
2.2	Cinématique des grandes transformations élastoviscoplastiques . . . . .	49
2.2.1	Cas général. Définitions . . . . .	49
2.2.2	Petites déformations élastiques . . . . .	52
2.3	Equations d'équilibre . . . . .	53
2.4	Lois de comportement hyperélastique . . . . .	54
2.4.1	Relations générales . . . . .	54
2.4.2	Petites déformations élastiques . . . . .	55
2.4.3	Milieu isotrope . . . . .	55
2.4.4	Notation de Voigt . . . . .	55
2.4.5	Valeurs des constantes élastiques . . . . .	56
2.5	Lois d'écoulement et d'écrouissage . . . . .	56
2.5.1	Loi d'écoulement . . . . .	56
2.5.2	Loi d'écrouissage . . . . .	58
2.5.3	Commentaires . . . . .	61
2.5.4	Identification des coefficients de la loi d'écrouissage . . . . .	61
<b>3</b>	<b>Méthode des éléments finis dans le cas du monocristal</b>	<b>69</b>
3.1	Principe des puissances virtuelles . . . . .	69
3.1.1	Formulation lagrangienne réactualisée . . . . .	69
3.1.2	Estimation des incréments de glissement par la méthode du "Forward Gradient" . . . . .	71
3.1.3	Ecriture finale du principe des puissances virtuelles . . . . .	73
3.2	Discrétisation du principe des puissances virtuelles . . . . .	73
3.2.1	Discrétisation . . . . .	73
3.2.2	Système linéaire . . . . .	74
3.3	Actualisation de la configuration et de l'état . . . . .	74
3.3.1	Introduction . . . . .	74
3.3.2	Actualisation de la configuration . . . . .	75
3.3.3	Actualisation par un schéma explicite : méthode du "Forward Gradient" . . . . .	75
3.3.4	Actualisation par une méthode implicite . . . . .	75
3.3.5	Comparaison entre les deux méthodes . . . . .	77
3.4	Gestion des conditions aux limites de type mors mobiles . . . . .	77
3.4.1	Présentation du problème . . . . .	77
3.4.2	Equilibre du mors . . . . .	78
3.4.3	Nouveau système linéaire . . . . .	80
3.4.4	Commentaire . . . . .	81
3.5	Structure algorithmique du programme informatique . . . . .	81
3.5.1	Généralités sur le code . . . . .	81
3.5.2	Algorithme principal . . . . .	82
3.5.3	Algorithme du calcul des variables pour un incrément . . . . .	82

3.5.4	Informations techniques . . . . .	82
3.5.5	Le post-traitement des données . . . . .	84
<b>4</b>	<b>Simulation de l'essai de traction</b>	<b>89</b>
4.1	Description de l'éprouvette . . . . .	89
4.1.1	L'élément fini utilisé . . . . .	89
4.1.2	Maillage de l'éprouvette . . . . .	89
4.1.3	Les conditions aux limites . . . . .	89
4.2	Ajustement des paramètres et tests numériques . . . . .	92
4.2.1	Incrément de déformation par pas . . . . .	92
4.2.2	Choix du paramètre $\beta$ . . . . .	94
4.2.3	Valeur du critère de filtrage sur les systèmes . . . . .	94
4.3	Simulation d'essais de traction sur les monocristaux dans le cas isotrope	95
4.3.1	Eprouvettes : conditions aux limites et orientation . . . . .	95
4.3.2	Analyse des résultats pour l'éprouvette orientée pour le glissement double . . . . .	95
4.3.3	Analyse des résultats pour l'éprouvette orientée pour un glissement simple initial . . . . .	98
4.3.4	Conclusions . . . . .	103
4.4	Influence des paramètres de la lois sur les courbes $(\tau, \gamma)$ . . . . .	103
4.4.1	Description de l'essai utilisé . . . . .	103
4.4.2	Influence de la distance d'annihilation . . . . .	106
4.4.3	Influence de la variable K (taux de production des dislocations)	106
4.4.4	Influence de l'anisotropie . . . . .	106
4.5	Effet de l'orientation initiale . . . . .	106
4.6	Influence des conditions aux limites . . . . .	107
	<b>Conclusion</b>	<b>114</b>
1.7	Conclusions . . . . .	114
1.8	Perspectives . . . . .	115
	<b>Bibliographie</b>	<b>116</b>



# Liste des Figures

1.1	Projection stéréographique avec les différents systèmes actifs lors d'un essai de traction uniaxiale (structure CFC). . . . .	9
1.2	Contrainte résolue exercée sur une dislocation. [Teo75] . . . . .	9
1.3	Exemple d'une dissociation possible permettant de rendre compte d'un sens de glissement facile et d'un sens de glissement difficile . . .	11
1.4	Génération d'une boucle de dislocation par le mécanisme de Franck et Read . . . . .	11
1.5	Éprouvette monocristalline soumise à une traction simple . . . . .	14
1.6	Définition des différentes grandeurs utilisées lors de la description de l'essai de traction uniaxiale . . . . .	14
1.7	Courbe reliant la cission réduite $\tau$ , sur le système s'activant en premier, selon le critère de Schmid, au glissement $\gamma$ sur ce système en le supposant seul actif . . . . .	17
1.8	Intersection de deux systèmes de glissement dans le cas d'une situation symétrique initialement stable dans l'aluminium raffiné. $G=16000$ . [Jao65] . . . . .	17
1.9	Représentation schématique de comportement pour diverses orientations des matériaux cubiques à faces centrées . . . . .	19
1.10	Courbe de la cission résolue en fonction du glissement pour des monocristaux de cuivre à diverses températures. [DB60] . . . . .	19
1.11	Zone pour laquelle deux systèmes sont actifs à cause des couples existant dans l'éprouvette (structure cubique à faces centrées). . . . .	22
1.12	Détermination d'une courbe $(d\tau/d\gamma, \gamma)$ en utilisant : a) uniquement les formules en glissement simple, b) les formules en glissement simple puis en glissement double. [BZ76] . . . . .	22
1.13	Évolution du taux de durcissement latent entre systèmes sécants en fonction de la cission sur le système primaire, cas du cuivre. [MC82] . . . . .	25
1.14	Variation de l'anisotropie de l'écrouissage en fonction de l'énergie de faute d'empilement $E$ et pour diverses valeurs du glissement primaire. [Fra84] . . . . .	25
1.15	Schéma du dispositif de compression plane . . . . .	30
1.16	Quelques cas pris en compte par la loi de durcissement proposée par Weng. [Wen87] . . . . .	30

1.17	Courbe $(\tau, \theta)$ pour un seul système actif, dans le cas d'un écrouissage cinématique linéaire obtenue avec les lois de Cailletaud . . . . .	33
1.18	Courbe d'écrouissage $dr/d\theta$ en fonction de $r$ en glissement simple dans le cas d'un écrouissage isotrope, obtenue avec les lois proposées par Cailletaud . . . . .	33
1.19	Représentation des axes liés à l'éprouvette . . . . .	40
1.20	Evolution du rapport de la contrainte $\tau$ sur la cission critique $\tau_0$ en fonction de l'angle $\eta$ de la rotation du réseau . . . . .	40
1.21	Evolution de la dérivée de l'angle de rotation $\eta$ de la rotation du réseau par rapport à $\gamma$ , en fonction de l'angle $\eta$ . . . . .	42
1.22	Définition des grandeurs cinématiques utilisées par Pierce et al. [PAN82] . . . . .	42
1.23	Conditions aux limites imposées sur un quadrant de l'éprouvette monocristalline . . . . .	44
2.1	Définitions des grandeurs cinématiques . . . . .	48
2.2	Définition des grandeurs associées aux équations d'équilibre . . . . .	48
2.3	Définition des diverses grandeurs de déformation et des configurations associées avec la déformation élastoviscoplastique . . . . .	57
2.4	Forme de la matrice des constantes élastiques dans les axes cristallographiques de métaux à structures cubiques à faces centrées (notation de Voigt) . . . . .	57
2.5	Courbe cission critique $\tau$ en fonction du glissement cristallographique $\gamma$ obtenue dans le cas du cuivre pur en situation de glissement double . . . . .	66
3.1	Exemple schématique de mors à couteaux simples pour tirer une éprouvette . . . . .	79
3.2	Algorithme principal du programme . . . . .	83
3.3	Algorithme de calcul des variables pour un incrément . . . . .	86
3.4	Trace d'un plan de glissement sur une face de l'éprouvette . . . . .	86
4.1	Représentation de l'éprouvette, exemple de maillage . . . . .	93
4.2	Configuration de glissement simple en cisaillement . . . . .	93
4.3	Maillage de l'éprouvette en traction et orientations initiales . . . . .	96
4.4	Courbes $(\tau, \gamma)$ simulées en glissement double dans le cas isotrope . . . . .	97
4.5	Evolution des densités de dislocations pour l'éprouvette orientée en glissement double en fonction de la déformation . . . . .	99
4.6	Courbe $(\tau, \gamma)$ simulée locale pour une éprouvette orientée en glissement simple initial et le cas isotrope . . . . .	100
4.7	Courbes $(\tau, \gamma)$ simulées globales pour une éprouvette orientée en glissement simple et la loi isotrope . . . . .	100
4.8	Evolution des densités de dislocations primaires et secondaires en fonction de la déformation . . . . .	102

4.9	Evolution de la rotation pour l'essai dont l'axe de traction a l'orientation initiale [125]	102
4.10	Isovaleurs de la contrainte longitudinale à l'intérieur de l'éprouvette en stade I et stade II	104
4.11	Forme de l'éprouvette en stade I et en stade II et aspect des lignes de glissement	105
4.12	Courbes $(\tau, \gamma)$ obtenues avec la loi de comportement isotrope et les conditions aux limites de type III	108
4.13	Influence de la distance d'annihilation sur les courbes $(\tau, \gamma)$ à trois stades	109
4.14	Influence de la variable K	110
4.15	Influence de l'anisotropie sur les courbes $(\tau, \gamma)$ à trois stades	111
4.16	Influence de l'orientation initiale sur les courbe $(\tau, \gamma)$	112
4.17	Courbes de traction pour des essais de traction sur du cuivre [Fra84]	112
4.18	Influence des conditions aux limites sur la courbe $(\tau, \gamma)$ d'un essai dont l'axe de traction a l'orientation initiale [125].	113

# Listes des Tableaux

2.1	Valeurs des constantes élastiques du cuivre et de l'aluminium en GPa.	66
2.2	Grandeurs caractéristiques obtenues pour l'essai de traction . . . . .	66
2.3	Valeurs numériques des coefficients de la loi d'écroutissage dans le cas où le matériau est du cuivre pur à comportement isotrope. . . . .	68
4.1	Orientations des éprouvettes . . . . .	96
4.2	Systèmes de glissement actifs dans le cas des deux orientations choisies	97
4.3	Grandeurs caractéristiques simulées pour l'éprouvette orientée $[\bar{1}25]$ .	99
4.4	Valeurs des différents jeux de coefficients . . . . .	104
4.5	Orientations initiales pour les différentes simulations . . . . .	108



# Introduction

Les lois de comportement sont nécessaires à l'étude des matériaux. Ainsi, par exemple, en emboutissage, il est souhaitable d'avoir une loi de comportement réaliste afin de simuler correctement le comportement d'une tôle métallique soumise à des sollicitations complexes.

Lorsqu'on cherche à préciser le comportement d'un matériau métallique polycristallin, on très rapidement gêné par la complexité et le nombre des paramètres. Outre la taille des grains, le matériau est fortement influencé par la texture (répartition des orientations des grains).

Des techniques d'homogénéisation permettent d'obtenir, à partir du comportement d'un seul grain, la réponse du polycristal, c'est-à-dire, d'une part les contraintes et les déformations dues aux actions combinées de l'ensemble des grains sur le grain considéré, d'autre part, l'évolution des fonctions de distribution des orientations cristallographiques.

L'utilisation de telles méthodes nécessite la détermination et l'identification de modèles de comportement du monocristal qui soient à la fois :

- très performants car le comportement des monocristaux est très complexe,
- très peu couteux en temps de calcul si on souhaite les utiliser dans des méthodes d'homogénéisation elles-mêmes très consommatrice de temps de calcul.

Les résultats obtenus avec un modèle performant de comportement du monocristal doivent être en accord avec l'essentiel des réalités expérimentales. En consultant la littérature du monocristal et notamment celle relative aux essais macroscopiques, on s'aperçoit que malgré la quantité de travail fourni, il n'existe pas de consensus quant au traitement des données et à l'interprétation des résultats.

La déformation du monocristal est accommodée de manière discrète par des dislocations réparties en systèmes de glissement. Cette accommodation plastique, par nature discontinue, est responsable, lors des essais expérimentaux de fortes non-homogénéités qui dépendent de la géométrie, de la structure du matériau et des conditions de déformation imposées à l'éprouvette. Ces phénomènes se cumulent et rendent très difficile le dépouillement des résultats.

Notamment en traction, les formules utilisées pour traiter les courbes force déplacement, quoique appliquées depuis longtemps, sont limitées quant à leur champ d'application par des hypothèses très restrictives : champ des contraintes homogènes, déformations homogènes..., qui sont des conditions très rarement rencontrées. Ces

formules sont pourtant largement utilisées dans la littérature, car il n'existe pas d'autres moyens pour dépouiller les résultats expérimentaux.

Malgré ces considérations, beaucoup de chercheurs ont eu la préoccupation d'identifier les coefficients intervenant dans des lois de comportement des monocristaux. Chacun de ces travaux est performant dans un domaine : écrouissage, évolution des densités de dislocations... mais présente un caractère incomplet dans la mesure où :

- ces études sont souvent faites pour des petites déformations ;
- les lois sont développées pour rendre compte d'un nombre trop restreint de résultats ;
- les paramètres considérés ne sont pas des variables d'état ;
- ces travaux font souvent abstraction de la viscosité du matériau.

Le travail présent a pour but d'établir une loi de comportement du monocristal monphasé en accord avec les résultats expérimentaux sélectionnés dans la littérature mais suffisamment maniable pour être utilisable dans un code de simulation des monocristaux, des agrégats de monocristaux (multicristal) et/ou dans les modèles de passage micro-macro du polycristal. L'effet de la vitesse de déformation sera présent si la loi est de type viscoplastique. Les principaux points à intégrer sont :

- structure cristallographique du matériau (limitation aux structures cubiques),
- comportement élastoviscoplastique avec écrouissage,
- sensibilité à la température,
- évolutions des paramètres internes du matériau lors de la déformation (densités de dislocations).

Le modèle ne représentera pas les phénomènes d'interactions des dislocations avec les précipités (cisaillement et contournement). L'identification d'une telle loi exige la précision du contexte mécanique utilisé qui fera appel, dans notre étude, au formalisme des grandes transformations et rotations. Du fait des non-homogénéités rencontrées dans le monocristal, ces lois ne peuvent être intégrées simplement, c'est pourquoi, nous avons mis au point un programme utilisant la méthode des éléments finis pour la simulation d'agrégats cristallins. Pour simuler l'effet de différentes conditions d'essai rencontrées en traction simple, la gestion de conditions aux limites de type mors mobile a été incorporée. Il a fallu développer des modules informatiques spécifiques pour traiter les particularités de l'écoulement plastique du monocristal, notamment la très forte non-linéarité de la loi d'écoulement. Nous avons utilisé ce programme dans deux buts : identification du modèle et simulation d'essais expérimentaux. Une fois le modèle identifié, nous avons pu analyser les phénomènes se produisant en traction des monocristaux et identifier leurs causes.

La première partie de ce travail rapporte les principaux résultats concernant l'étude de la déformation plastique accommodée par glissement de dislocations dans quatre domaines :

- l'observation,

- les travaux expérimentaux,
- les différentes lois de comportement proposées pour le monocristal,
- les simulations menées sur les monocristaux.

Le modèle que nous avons adopté pour le monocristal est exposé dans le second chapitre. Le cadre cinématique ainsi que les lois de comportement élastique et plastique sont définis.

La théorie du programme est précisée au troisième chapitre. Les solutions numériques retenues pour traiter les particularités inhérentes à la simulation des monocristaux sont exposées.

Le quatrième chapitre concerne l'application du code à la simulation de divers essais de traction et l'analyse de ces résultats.

Dans la dernière partie sont présentées les conclusions de ce travail et les perspectives qu'il permet d'envisager pour le traitement de la plasticité des monocristaux.





# Chapitre 1

## Etude bibliographique

### 1.1 Introduction

On peut décomposer la construction d'un modèle de comportement pour le monocristal suivant des *étapes* utilisées lors de la construction de tout modèle.

La première étape comprend les *observations* qui mettent en évidence l'accommodation de la déformation plastique des métaux par glissement de dislocations.

La deuxième étape est une *phase expérimentale* où on provoque certains phénomènes de façon à contrôler les connaissances déjà acquises ou à suggérer de nouvelles idées sur le comportement. L'essai le plus utilisé dans ce domaine, est l'essai de traction qui comporte de nombreuses spécificités pour le monocristal.

*La représentation du comportement* au moyen de lois mathématiques, s'appuyant sur les résultats expérimentaux, constitue la troisième étape.

L'intégration de ces lois de comportement dans des équations de la mécanique des milieux continus et leur traitement (grâce à la méthode des éléments finis par exemple) permet l'obtention de *modélisations complètes* du comportement du monocristal.

En suivant ce schéma, on rappelle les différents résultats obtenus dans la littérature, concernant :

- la déformation par glissement de dislocations,
- les diverses expériences pratiquées sur les monocristaux,
- les diverses modélisations réalisées de l'écoulement et de l'écrouissage,
- les simulations complètes de la déformation du monocristal.

## 1.2 Physique de la déformation plastique par mouvement de dislocations

### 1.2.1 Introduction

Un essai de traction sur un matériau métallique met en évidence deux domaines de déformation. *Un domaine élastique* pour lequel la déformation est réversible et un domaine de *déformation plastique* où la déformation est permanente. Physiquement, la déformation plastique s'opère par un glissement des atomes les uns sur les autres. Un calcul théorique de la résistance élastique du cristal, en supposant une rupture simultanée des liaisons inter-atomiques, surestime très largement la limite élastique observée expérimentalement (de l'ordre de 1000 fois). Cette incohérence a amené Taylor, Polanyi et Orowan [Tay34,Pol34,Oro34], en 1934, à utiliser le concept de dislocations sur lequel on s'appuie aujourd'hui pour décrire la plasticité des métaux mais, bien que de nombreuses études aient été effectuées sur ce sujet, cette partie de la science des matériaux demeure un domaine largement ouvert.

Le maillage, qui est un autre mode de déformation plastique, ne sera pas abordé ici. Cette étude porte principalement sur la déformation plastique par mouvement de dislocations dans les monocristaux métalliques monophasés à structure cubique centrée (CC) et cubique à faces centrées (CFC) sans être exhaustive. Des informations détaillées et générales sur la déformation par glissement de dislocations pourront être trouvées dans [Jao65,Fri64,HL68]

### 1.2.2 Mouvement des dislocations

#### Systèmes de glissement

La dislocation est un défaut cristallin linéaire dont le déplacement est progressif. Son déplacement entraîne une rupture successive des liaisons inter-atomiques le long de sa ligne, plus facile que le cisaillement simultané dans tout le plan, expliquant ainsi la faible valeur expérimentale de la limite élastique. Une dislocation glisse dans un plan et selon une direction donnés. Ce plan et cette direction ne sont pas quelconques : ils correspondent aux plans cristallographiques les plus denses et à des directions cristallographiques déterminées (systèmes de glissement). Le système (s) est identifié par le vecteur unitaire de la normale au plan de glissement  $\mathbf{n}^{(s)}$  et par le vecteur unitaire  $\mathbf{g}^{(s)}$  parallèle à la direction de glissement appelé vecteur de Burgers. Pour les métaux cubiques, les systèmes de glissement sont les suivants :

	Directions	Plans
Cubiques à faces centrées	: $\langle 110 \rangle$	$\{111\}$
Cubiques centrés	: $\langle 111 \rangle$	$\{110\}$
	$\langle 112 \rangle$	$\{110\}$

### 1.2.3 Cission critique

#### Loi de Schmid

Schmid a formulé les conditions pour lesquelles il y a écoulement sur un système. Sa loi permet, en bon accord avec l'expérience, de déterminer quels sont les systèmes sur lesquels un glissement se produit : l'activation aura lieu si la cission résolue, contrainte de cisaillement exercée dans le plan de glissement suivant la direction de glissement, atteint une cission critique  $\tau_C$ . Si  $\boldsymbol{\sigma}$  est le tenseur des contraintes appliquées au matériau, la cission résolue  $\tau^{(s)}$  pour le système (s) s'exprime par :

$$\tau^{(s)} = g_i^{(s)} \sigma_{ij} n_j^{(s)} = \sigma_{ij} M_{ij}^{(s)} \quad (1.1)$$

où :

$$M_{ij}^{(s)} = \frac{1}{2}(g_i^{(s)} n_j^{(s)} + g_j^{(s)} n_i^{(s)})$$

$g_i^{(s)}, \sigma_{ij}, n_j^{(s)}, i = 1, 3, j = 1, 3$  sont respectivement les composantes, dans le repère macroscopique lié à l'éprouvette, de  $\mathbf{n}^{(s)}, \boldsymbol{\sigma}$  et  $\mathbf{g}^{(s)}$ . La loi de Schmid s'écrit :

$$\tau^{(s)} = \tau_C^{(s)} \text{ et } \dot{\tau}^{(s)} > 0 \Rightarrow \dot{\gamma}^{(s)} > 0 \quad (1.2)$$

où  $\dot{\gamma}^{(s)}$  est la vitesse de glissement sur le système (s). En traction, grâce à cette loi, on détermine les systèmes actifs en fonction de la position initiale du point figuratif de l'axe de traction sur une projection stéréographique. Pour les métaux à structure cubique à faces centrées, un seul système est actif par triangle de référence. Si le point figuratif de l'axe de traction se trouve sur la frontière de plusieurs triangles, tous les systèmes actifs dans les triangles seront actifs (glissement multiple). La figure 1.1 donne, pour chaque triangle, le système actif en utilisant la notation de Schmid et Boas définie ci-après.

Plans	Directions	
A ( $\bar{1}11$ )	1 [011]	2 [ $0\bar{1}1$ ]
B (111)	3 [101]	4 [ $\bar{1}01$ ]
C ( $\bar{1}\bar{1}1$ )	5 [ $\bar{1}10$ ]	6 [110]
D (1 $\bar{1}\bar{1}$ )		

#### Analyse physique

L'écoulement sur un système correspond à un mouvement d'ensemble des dislocations de ce système et ne prend pas uniquement en compte le comportement individuel d'une dislocation. La longueur  $l^{(s)}$  des segments de dislocations est dispersée autour d'une valeur moyenne  $\bar{l}$ . Cette longueur est définie par les points d'ancrage que sont les dislocations forêts qui percent le plan de glissement. La contrainte critique qui provoque le mouvement de la dislocation est inversement proportionnelle à la longueur du segment  $l^{(s)}$  :

$$\tau_C^{(s)} = \alpha \mu b \frac{1}{l^{(s)}}.$$

La contrainte critique  $\bar{\tau}_C^{(s)}$  est par définition :

$$\bar{\tau}_C^{(s)} = \alpha \mu b \frac{1}{\bar{l}^{(s)}},$$

Pour des cisssions résolues inférieures à  $\bar{\tau}_C^{(s)}$ , quelques segments de dislocations se déplacent, mais ils ne traversent pas le cristal car ils sont bloqués par des zones dures où les obstacles sont plus denses. La phase où les dislocations traversent le cristal correspond statistiquement selon les calculs de Kocks [Koc66] à :  $0,9\bar{\tau}_C^{(s)} < \tau < \bar{\tau}_C^{(s)}$ . Les obstacles sont alors presque tous franchissables. Cette théorie explique la microplasticité qui s'opère avant l'activité globale d'un système de glissement.

### Franchissement thermiquement activé des obstacles

**Description.** Il existe à l'intérieur du monocristal des obstacles étendus, générateurs de contraintes à longue distance et des obstacles locaux, générateurs de contraintes à courte distance. Les segments de dislocations franchissent ces obstacles lorsqu'ils sont soumis à la cisssion réduite appliquée :  $\tau$ . Au zéro de la température absolue,  $\tau$  est égale à la plus grande contrainte interne  $\tau_0$ . Dès que la température s'élève, les atomes s'agitent et la cisssion  $\tau$  nécessaire pour franchir l'obstacle devient inférieure à  $\tau_0$  (voir figure 1.2). On note  $\tau^*$  la cisssion réduite effective qui permet le franchissement d'un obstacle local :

$$\tau^* = \tau - \tau_\mu$$

$\tau_\mu$  est la contrainte interne à longue distance.  $\tau$  ne peut pas être inférieure à  $\tau_\mu$  car le franchissement des obstacles étendus n'est pas assisté par l'agitation thermique. Une analyse détaillée du mouvement thermiquement activé des dislocations est présentée par Groh [Gro79] et Teodosiu [Teo75].

Nous notons ici la nature de quelques obstacles dont le franchissement est thermiquement activé et dont le rôle est important dans l'écoulement plastique des monocristaux.

**Les forces de Peierls** sont détaillées par Philibert [Phi79]. Les dislocations doivent franchir des barrières correspondant aux rangées denses d'atomes dans un plan de glissement.  $\tau_P$  est la contrainte de Peierls qu'il faut appliquer pour franchir cet obstacle à température absolue nulle. Dans les matériaux à haute contrainte de Peierls, les dislocations ont alors des formes polygonales parce que les atomes occupent des positions de moindre énergie, parallèles aux rangées denses d'atomes. Pour une température inférieure à la moitié de la température de fusion, ce mécanisme contrôle la déformation des métaux cubiques centrés [GD67].

Lorsque la température est supérieure, des effets de dissociation de coeur des dislocations vis se produisent. Dans ce cas, l'origine de la friction de réseau sur les dislocations est différente, mais on désigne parfois ce phénomène avec le nom de force de Peierls ; ce qui conduit parfois à des confusions.

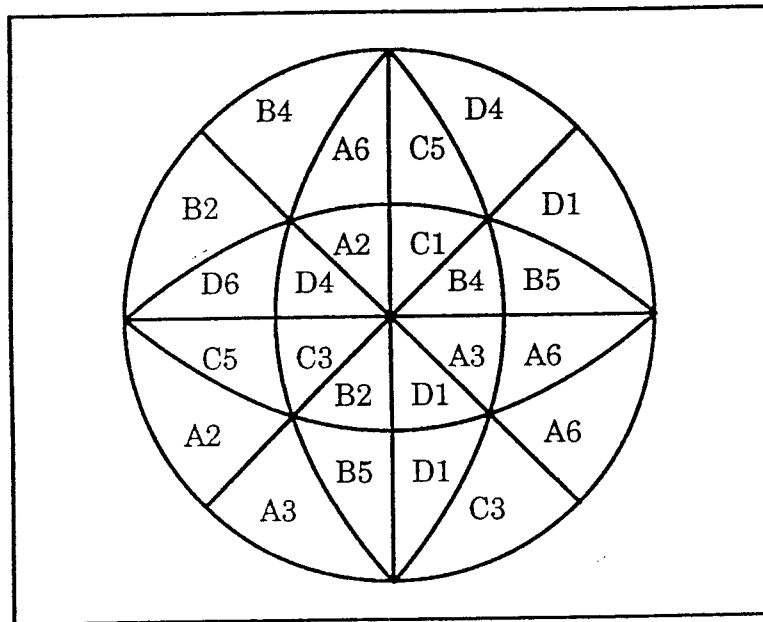


Figure 1.1: Projection stéréographique avec les différents systèmes actifs lors d'un essai de traction uniaxiale (structure CFC).

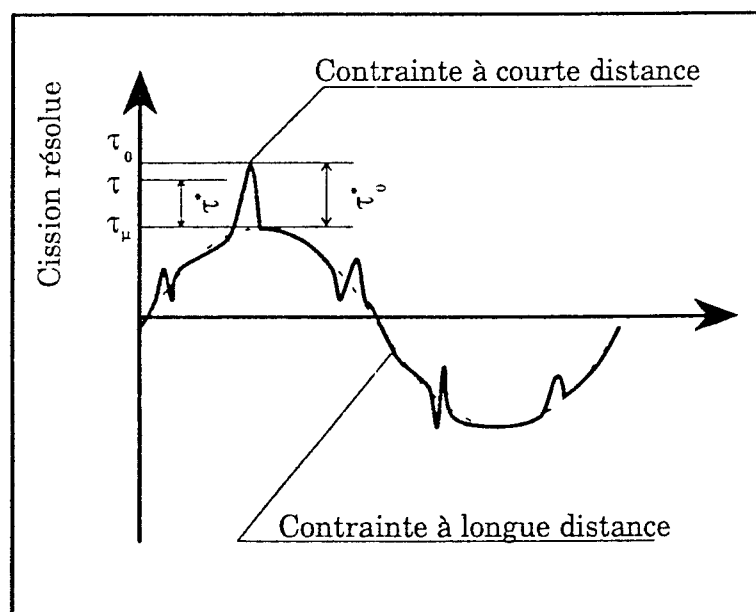


Figure 1.2: Contrainte résolue exercée sur une dislocation. [Teo75]

**Les mécanismes de dissociation-recombinaison des dislocations vis** dans les structures cubiques centrées, ont été décrits par [Esc66,Hir68,ND67,KV67]. A des températures intermédiaires, lorsque les vis sont dissociées, le modèle de Peierls donne des résultats irréalistes. Ces dislocations contrôlent alors le mouvement du matériau. Dans les métaux cubiques centrés, les dislocations vis sont dissociées sur deux ou trois plans et sessiles. Pour se mouvoir, il faut qu'elles deviennent glissiles par constriction dans leur plan de glissement. Un certain nombre de phénomènes physiques observés expérimentalement s'expliquent grâce à ce mécanisme de dissociation-recombinaison des dislocations vis :

- dépendance de la cission critique avec la température ;
- moindre mobilité des dislocations vis (qui sont seules dissociées) lorsque la température décroît ;
- dépendance de la contrainte seuil dans les plans  $\{112\}$  (voir figure 1.3) ;
- facilité du glissement dévié dans les structures où l'énergie d'activation de ce dernier n'est pas plus grande que l'énergie de constriction des dislocations vis.

**Les dislocations forêts** sont les dislocations des systèmes qui percent le plan de glissement du système actif. Le franchissement de ces obstacles est sensible à l'activation thermique.

## 1.2.4 Ecrouissage

### Description

Lorsqu'un système glisse, il interagit avec des obstacles de différentes natures : les éléments d'addition, les précipités, les arbres formés par les dislocations des autres systèmes, les débris laissés lors du glissement. Ces interactions limitent le déplacement des dislocations, provoquent une réduction des longueurs moyennes des segments de dislocations et sont ainsi responsables de l'augmentation de la cission critique que l'on appelle écrouissage. Au cours de cet écrouissage sont également mis en évidence des phénomènes de génération et d'annihilation de dislocations.

### Mécanisme de Franck et Read.

Franck et Read [FR50] ont imaginé en 1950 un mécanisme possible de création de dislocations. Un segment de dislocation ancré en deux points à ses extrémités va se courber sous la cission réduite. Il se forme ainsi une boucle de dislocation qui grandit lorsque la cission croit. A partir d'une certaine valeur de la cission, une boucle autonome est formée et le segment reprend sa forme initiale et génère une autre boucle (figure 1.4).

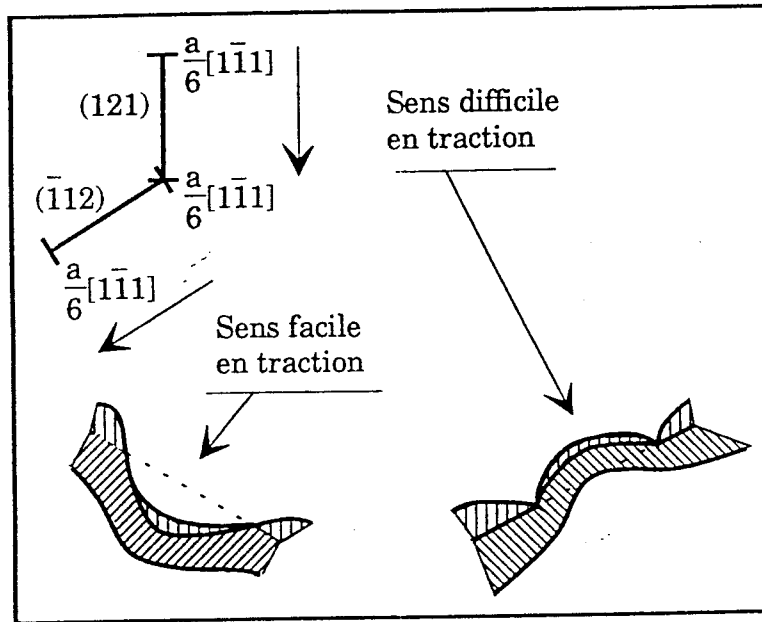


Figure 1.3: Exemple d'une dissociation possible permettant de rendre compte d'un sens de glissement facile et d'un sens de glissement difficile

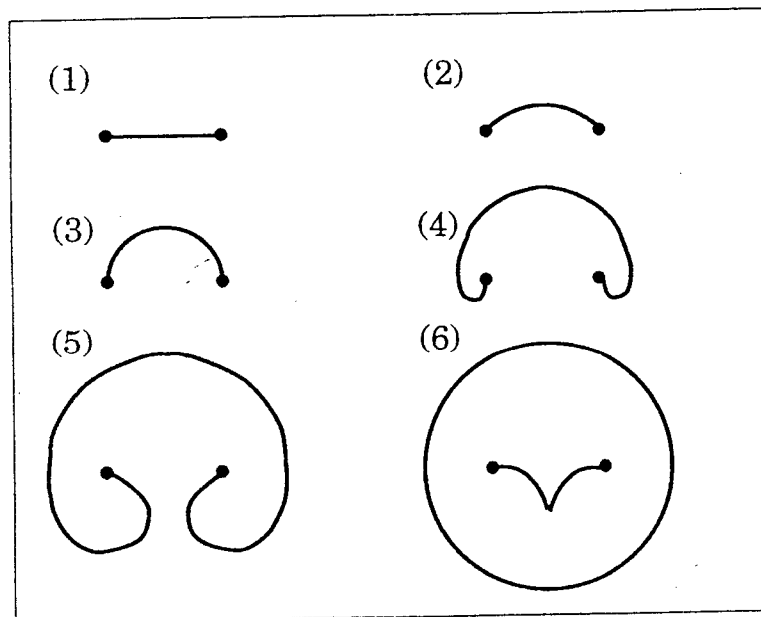


Figure 1.4: Génération d'une boucle de dislocation par le mécanisme de Franck et Read



### Mécanisme d'annihilation

Deux lignes de dislocation dans un même plan, mais avec une direction de glissement opposée disparaissent lorsqu'elles sont suffisamment proches l'une de l'autre. L'agitation thermique et le glissement dévié autorisent cette annihilation lorsque ces deux dislocations sont dans des plans parallèles mais non confondus. On constate expérimentalement l'existence d'une distance critique séparant deux lignes de dislocation d'un même système mais de sens de glissement opposé en dessous de laquelle elles s'annihilent.

## 1.3 Expériences et résultats caractéristiques sur les monocristaux

### 1.3.1 Introduction

L'observation microscopique des dislocations, du fait de leur densité (de  $10^6\text{m}^{-2}$  à  $10^{13}\text{m}^{-2}$ ), est très difficile et de nombreux travaux ont essayé, en s'appuyant sur des essais macroscopiques de caractériser et de déterminer les phénomènes inhérents aux mouvements des dislocations qui se produisent en déformation plastique, malgré les nombreux problèmes expérimentaux posés par les monocristaux :

- la contrainte d'écoulement d'un monocristal bien recuit est très faible, aussi doit-il être manipulé avec extrême précaution ;
- la découpe doit être effectuée par électroérosion pour ne pas générer de contraintes internes dans l'éprouvette (ce que provoquerait un usinage mécanique par exemple) ;
- la fixation de l'éprouvette sur la machine doit être effectuée au moyen de mors à double couteaux pour ne pas induire de couples parasites consécutifs à la rotation de réseau par glissement des dislocations.

### 1.3.2 Traction uniaxiale. Les courbes $(\tau, \gamma)$

#### Généralités

Une grande partie des études expérimentales réalisées sur les monocristaux ont été effectuées à l'aide de l'essai de traction. Le résultat le plus souvent présenté est une courbe qui relie la cission résolue  $\tau$ , sur le système s'activant en premier selon le critère de Schmid en fonction du glissement cristallographique  $\gamma$  sur ce système. Il est intéressant de rappeler comment les courbes  $(\tau, \gamma)$  sont obtenues. L'obtention des grandeurs cission résolue et glissement cristallographique se fait grâce aux relations établies par Schmid et Boas et reprises par [DF69,BJ65].

### Glissement simple

L'éprouvette est soumise à une traction simple homogène. Les composantes du tenseur des contraintes dans le repère de la figure 1.5 sont données par :

$$\begin{pmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

La cission résolue dans chaque système est donnée par :

$$\tau^{(s)} = g_i^{(s)} \sigma_{ij} n_j^{(s)} = g_1^{(s)} \sigma n_1^{(s)} = \sigma \cos \phi^{(s)} \cos \lambda^{(s)},$$

où  $\phi$  est l'angle entre la normale  $\mathbf{n}^{(s)}$  et l'axe de traction,  $\lambda$  est l'angle entre le vecteur  $\mathbf{g}^{(s)}$  et l'axe de traction.  $\cos \phi^{(s)} \cos \lambda^{(s)}$  est le facteur de Schmid compris entre 0 et 0.5 en traction et que l'on trouve parfois sous la forme  $\sin \chi^{(s)} \cos \lambda^{(s)}$  (voir figure 1.6) où  $\chi$  est l'angle entre le plan et l'axe de traction. Le premier système actif est celui pour lequel le facteur de Schmid est le plus grand. Pour qu'il n'y ait qu'un seul système actif, le point figuratif de l'axe de traction doit être à l'intérieur du triangle standard  $[001][011][\bar{1}11]$ . Le glissement cristallographique est donné par l'expression :

$$\gamma = \frac{[(l/l_0)^2 - \sin^2 \lambda_0]^{\frac{1}{2}} - \cos \lambda_0}{\cos \phi_0}, \quad (1.3)$$

avec,

- $l_0$  longueur initiale de l'éprouvette
- $l$  longueur courante de l'éprouvette
- $\lambda_0, \phi_0$  paramètres angulaires initiaux

La cission réduite pour ce système est :

$$\tau = \frac{F}{S_0} \frac{l}{l_0} \cos \phi \cos \lambda = \frac{F}{S_0} \cos \phi_0 [1 - (l_0/l)^2 \sin^2 \lambda_0]^{\frac{1}{2}} \quad (1.4)$$

- $F$  est la force de traction
- $S_0$  est la section initiale de l'éprouvette

### Glissement double

Lorsque l'axe de traction est sur la zone de symétrie  $[100][\bar{1}11]$  pour les métaux à structure cubique à faces centrées, deux systèmes  $(\mathbf{g}^{(1)}\mathbf{n}^{(1)})$  et  $(\mathbf{g}^{(2)}\mathbf{n}^{(2)})$  sont simultanément actifs. Des formules différentes sont nécessaires pour déterminer la cission

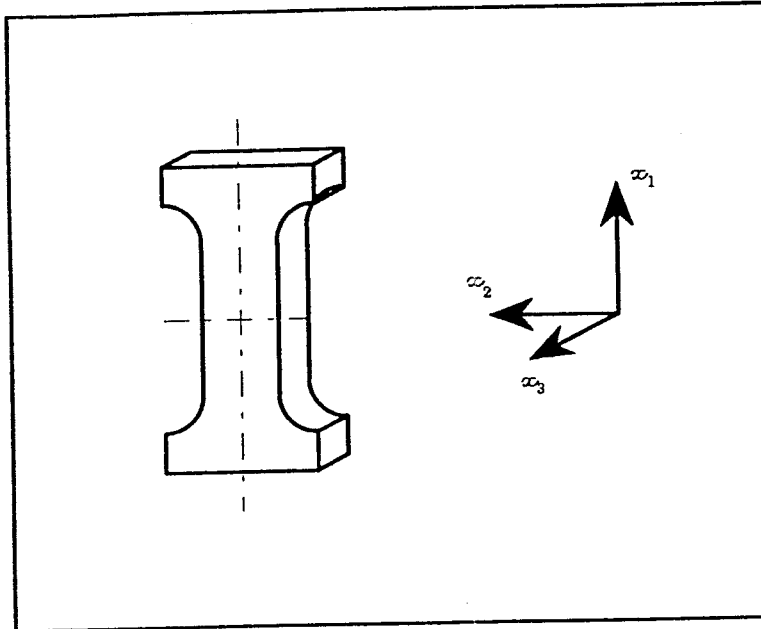


Figure 1.5: Epreuve monocristalline soumise à une traction simple

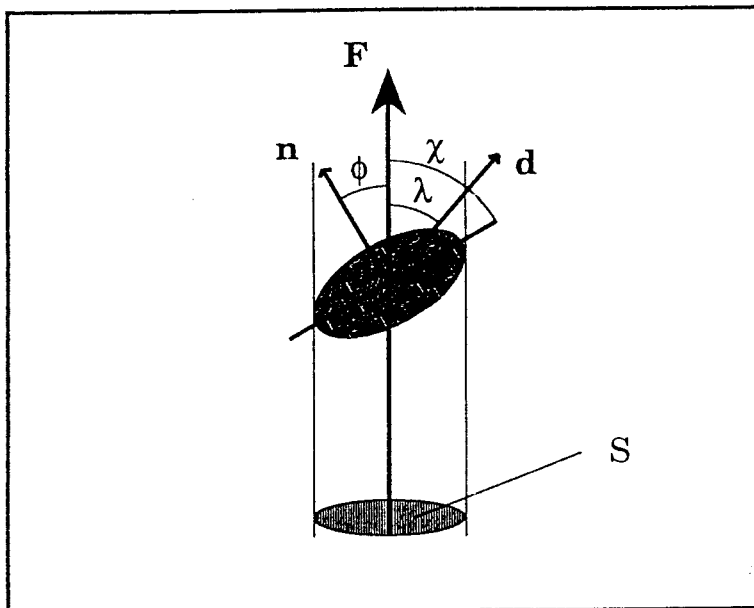


Figure 1.6: Définition des différentes grandeurs utilisées lors de la description de l'essai de traction uniaxiale

résolue  $\tau^{(1)} = \tau^{(2)}$  en fonction du glissement primaire  $\gamma^{(1)} = \gamma^{(2)}$ . Le glissement cristallographique total est donné par :

$$\gamma = \gamma^{(1)} + \gamma^{(2)} = \frac{l - l_0}{l_0 \cos \phi_0 \cos \lambda_0} \quad (1.5)$$

et la cission résolue :

$$\tau^{(1)} = \tau^{(2)} = \frac{F}{S_0} \cos \phi_0 \cos \lambda_0 (l/l_0) \quad (1.6)$$

Toujours pour les matériaux à structure cubique à faces centrées, si les vitesses de glissement restent égales sur chaque système, il se produit un déplacement de l'axe de traction le long de la zone  $[001]-[\bar{1}11]$  et si  $\phi$  est la distance angulaire de l'axe de traction à la direction  $[\bar{1}12]$ , l'expression du glissement cristallographique est donnée par :

$$\gamma = \sqrt{6} \ln \frac{1 + \sqrt{2} \cot \phi}{1 + \sqrt{2} \cot \phi_0}$$

### Forme de la courbe $(\tau, \gamma)$ -les différents stades de déformation

L'analyse des courbes  $(\tau, \gamma)$  corrélée avec des observations en microscopie électronique [BC'67, MS65] met en évidence trois stades principaux<sup>1</sup> au cours de la déformation par traction uniaxiale à l'intérieur du triangle standard (voir figure 1.7).

- stade I : stade de glissement facile où les dislocations du système le plus sollicité glissent dans leur plan sans rencontrer d'obstacles. La pente de la courbe est très faible :  $\mu/1400$  où  $\mu$  est le module de cisaillement du matériau.
- stade II : glissement double. A cause du changement d'orientation cristalline provoqué par l'activité du premier système, l'axe de traction a rejoint un axe de symétrie provoquant un glissement sur un deuxième système. L'interaction entre les dislocations des deux systèmes provoque un écrouissage plus important [SS71, LS83]. La pente est de l'ordre de  $\mu/300$  pour les cubiques à faces centrées et de  $\mu/500$  pour les cubiques centrés. Pour ces derniers, le stade II peut se réduire à un point d'inflexion.
- stade III : le durcissement diminue, ce stade est lié à l'apparition de glissement dévié des dislocations actives sur d'autres plans.

<sup>1</sup>Pour une étude détaillée des autres stades jusqu'à la rupture, voir [AGVH87]

### 1.3.3 Influence des paramètres sur la courbe $(\tau, \gamma)$

#### Les différents paramètres considérés

Divers auteurs se sont attachés à déterminer l'influence de différents paramètres sur la forme de ces courbes pour en déduire des informations sur le comportement des dislocations. Sont abordés :

- la nature des matériaux
- l'orientation initiale de l'axe de traction
- la température
- les conditions aux limites
- la géométrie de l'éprouvette

#### La nature des matériaux

De façon simplifiée, les matériaux dont nous voulons simuler le comportement se classent en deux catégories selon le comportement observé en traction.

1. Les métaux purs cubiques à faces centrées pour lesquels Von Goler et Sachs [GS55] observent que le durcissement est identique sur le système actif et sur les systèmes latents,
2. les métaux à structure cubique centrée pour lesquels la consolidation est plus importante sur les systèmes latents que sur le système actif.

Il faut noter que les métaux cubiques à faces centrées de pureté commerciale ou alliés dont l'énergie de faute d'empilement est relativement basse, présentent un écrouissage anisotrope similaire à celui des métaux cubiques centrés (Cf. paragraphe 1.3.5).

La différence de comportement due à l'anisotropie de durcissement apparaît lors d'un essai de traction sur une éprouvette orientée de façon à provoquer un glissement double simultané symétrique stable (pour un cubique à face centré, par exemple, ceci est possible si l'axe de traction appartient à la zone  $[001][111]$ ) :

- dans le cas isotrope, les systèmes se développent de façon simultanée ; sur la figure 1.8 obtenue avec un aluminium très raffiné dans les conditions de symétrie énoncées ci-dessus, chaque système a ses lignes de glissement déviées par l'autre, prouvant la simultanéité du développement des deux systèmes.
- pour les matériaux anisotropes, il n'est pas possible d'obtenir de tels résultats, la déformation de l'échantillon est non-homogène et des zones privilégiant l'un ou l'autre des deux systèmes apparaissent dans l'échantillon.

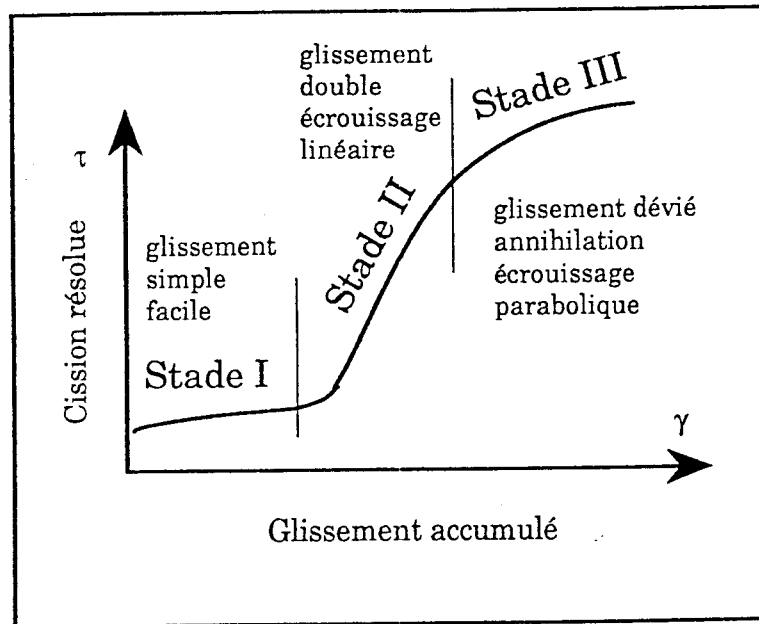


Figure 1.7: Courbe reliant la cission réduite  $\tau$ , sur le système s'activant en premier, selon le critère de Schmid, au glissement  $\gamma$  sur ce système en le supposant seul actif

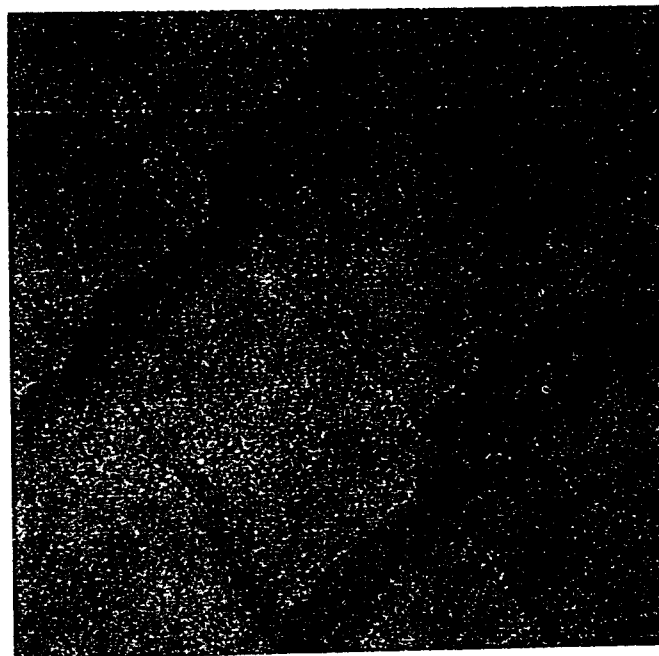


Figure 1.8: Intersection de deux systèmes de glissement dans le cas d'une situation symétrique initialement stable dans l'aluminium raffiné.  $G=16000$ . [Jao65]

Jaoul [Jao65] rapporte le comportement est également différent dans le cas d'une traction uniaxiale à l'intérieur du triangle standard. Pour un matériau dont la consolidation n'est pas très importante sur les systèmes latents, un système secondaire apparaît lorsque l'axe de traction se rapproche de la zone de symétrie et l'axe de traction finit par se stabiliser.

Pour des matériaux à comportement anisotrope, tel le fer, un seul système de glissement se développe principalement même pour de très grands allongements de l'éprouvette et il n'y a pas stabilisation sur la zone de symétrie ("overshooting"). Bell et al [BG67] ont rassemblé le résultat de nombreux essais sur différents matériaux pour lesquels l'axe de traction continue à tourner et traverse la zone de symétrie.

### Influence de l'orientation initiale

**Cubiques à faces centrées.** L'éprouvette est orientée pour un glissement simple (le point représentatif de l'axe de traction est situé à l'intérieur du triangle standard). L'extension du stade I augmente quand l'axe de traction est près de la zone  $[100][011]$ . Par contre, lorsque cet axe est proche de la zone de symétrie  $[100][\bar{1}11]$  le glissement facile diminue et le taux d'écroutissage en glissement simple croît. Près de la zone symétrique, un glissement double peut apparaître. Cependant la courbe reste convexe (elle n'est pas parabolique comme dans le cas d'une orientation parfaitement symétrique). La figure 1.9 rassemble ces différents résultats. L'apparition de glissement multiple, alors que l'orientation n'est pas symétrique, est provoquée par des contraintes supplémentaires sur les systèmes latents générées par les conditions aux limites (maintien des têtes dans l'axe, mors fixes).

**Cubiques centrés.** On note une très forte dépendance des résultats en fonction de la position de l'axe de traction à l'intérieur du triangle standard. Plus il est proche de la zone  $[001][111]$ , plus la pente du stade I est importante ; plus le stade II se raccourcit. Ces résultats semblent directement corrélés avec la densité de dislocations secondaires présentes dans le matériau [NK66,Tak69,SK70b,SK70a,KN67]. Par exemple, Keh trouve une relation linéaire entre l'écroutissage en stade I et II et le rapport de la densité de dislocations primaires sur la densité de dislocations secondaires mesurés pour des quantités de déformations identiques.

Lorsque le monocristal est tiré suivant un axe de symétrie cristallographique, les courbes présentent un écroutissage important ( $\mu/400$ ) consécutif à l'activation simultanée de plusieurs systèmes.

### Influence de la température

**Cubiques à faces centrées.** La température a un effet plus marqué sur la forme de la courbe que sur la valeur de la cission critique [DB60]. Une baisse de la tem-

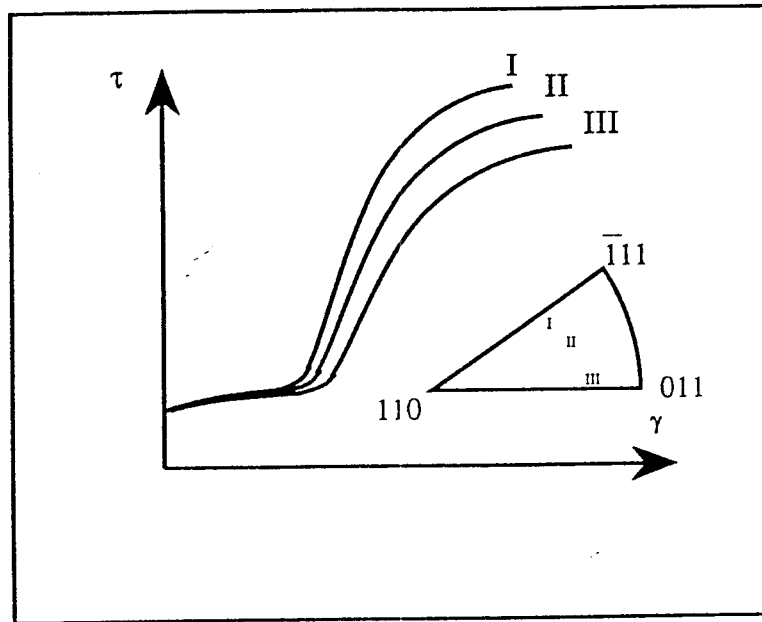


Figure 1.9: Représentation schématique de comportement pour diverses orientations des matériaux cubiques à faces centrées

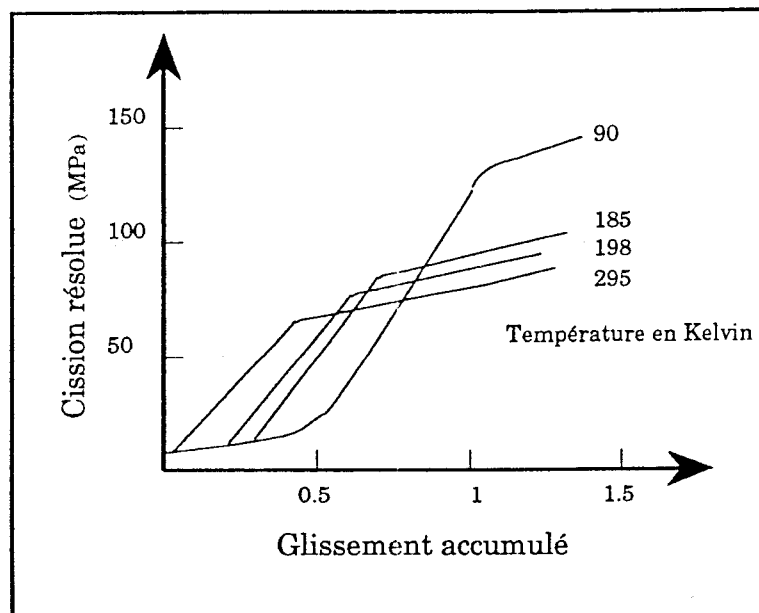


Figure 1.10: Courbe de la cission résolue en fonction du glissement pour des monocristaux de cuivre à diverses températures. [DB60]



température provoque une extension des stades I et II. Par contre la pente du stade II reste constante. L'explication de ces phénomènes réside en trois points :

- les barrières de Peierls sont très faibles, donc la température n'influe pas sur la contrainte d'écoulement ;
- l'interaction entre les dislocations est un phénomène thermiquement activé donc l'activation du deuxième système est retardée lorsque la température diminue ;
- le glissement dévié qui se produit lors du stade III est également un phénomène thermiquement activé donc l'apparition du glissement dévié qui initie le stade III se fera à des contraintes plus élevées si la température est basse.

**Cubiques centrés.** La contrainte d'écoulement des monocristaux cubiques centrés dépend fortement de la température [MS65,KN67,SK70b,Hir68]. A basse température la courbe ne présente plus trois stades distincts. Le tracé de la cission critique  $\tau$  (rapporté au module de cisaillement  $\mu$ ) en fonction de la température absolue (divisée par la température absolue de fusion du matériau) met en évidence trois domaines de sensibilité à la température :

- I : forte sensibilité ;  $0 < T < 0.3T_F$
- II : insensibilité ;  $0.3T_F < T < 0.5T_F$
- III : sensibilité ;  $0.5T_F < T$

La division de  $\tau$  par  $\mu$  permet de supprimer l'effet de la sensibilité de  $\mu$  à la température dans le domaine II qui se traduirait autrement par une droite légèrement non parallèle à l'axe des températures.

### **Influence des conditions aux limites, hétérogénéités de déformation**

Jaoul [Jao65] attire l'attention sur la difficulté d'obtention d'un état de contrainte simple dans une éprouvette, en particulier, il souligne le soin à apporter à la fixation du monocristal sur la machine. Même si le phénomène de rotation peut être complètement éliminé par l'utilisation de mors à double couteaux, l'existence d'une zone non-déformée dans l'éprouvette est encore source de perturbation de l'état de contrainte à l'intérieur de l'éprouvette. La rotation du réseau est responsable, du fait du maintien dans l'axe de l'éprouvette, de couples parasites dans l'éprouvette. Ces couples provoquent un effort tranchant perpendiculaire à l'éprouvette qui peut favoriser l'activité de systèmes secondaires. Pour certaines orientations, des calculs analytiques prévoient l'activation simultanée de deux systèmes (voir 1.11).

### Influence de la géométrie

Honeycombes [Hon84] rapporte une influence du diamètre de l'éprouvette sur la longueur du stade I. Une diminution de la section de l'éprouvette :

- limite le libre parcours moyen des dislocations primaires,
- diminue les couples induits dans l'éprouvette.

Les mêmes effets sont constatés par Basinski et Basinski [BZ76]. Ils notent une influence de la taille du cristal sur l'étendue du stade I et sur les taux de durcissement en stade I et II.

#### 1.3.4 Commentaires sur l'essai de traction

Il est à souligner que les paramètres qui sont relevés sur les courbes  $(\tau, \gamma)$  : pente, longueur des stades I et II dépendent du choix des formules en glissement simple ou glissement double. La figure 1.12 montre que les valeurs du taux d'écroutissage sont différentes, si on utilise soit les formules (1.3) et (1.4) de glissement simple ou les formules (1.5) et (1.6) de glissement double .

La plupart des auteurs utilisent les formules de glissement simple (1.3) et (1.4) pour décrire la totalité de l'essai. Ceci se justifie lorsque le durcissement est plus important sur le système secondaire que sur le système primaire, car la position d'équilibre, où les vitesses d'écoulement sont égales sur les deux systèmes, n'est atteinte qu'en fin d'essai et la contribution du système secondaire à la déformation reste faible. Lorsque le durcissement est isotrope, la position de stabilité de l'orientation coïncide avec la position de symétrie et la contribution du système secondaire à la déformation est plus importante, par conséquent l'emploi des formules de glissement simple pour décrire la totalité de l'essai est critiquable.

Les formules qui permettent l'obtention des courbes  $(\tau, \gamma)$  sont établies à partir d'hypothèses précises qui supposent notamment un état de contrainte homogène dont l'obtention est rendue possible expérimentalement par l'emploi de mors à double couteaux très difficiles à réaliser et à mettre en oeuvre. Dans la littérature, on dispose de relativement peu d'informations lorsque des courbes  $(\tau, \gamma)$  sont présentées, on ignore bien souvent la géométrie de l'éprouvette, les conditions aux limites imposées, or ce sont des paramètres qui interviennent de façon cruciale dans l'analyse des résultats.

Il est alors difficile de comparer les courbes relevées par différents auteurs. Il est également difficile de savoir si une information obtenue à l'aide de ces courbes n'a pas été influencée par l'un des nombreux paramètres qui interviennent dans un essai de traction.

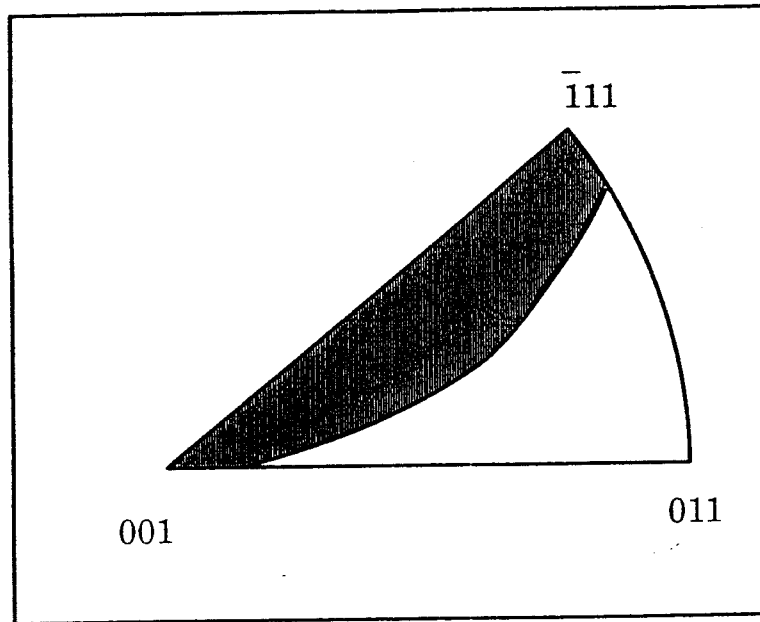


Figure 1.11: Zone pour laquelle deux systèmes sont actifs à cause des couples existant dans l'éprouvette (structure cubique à faces centrées).

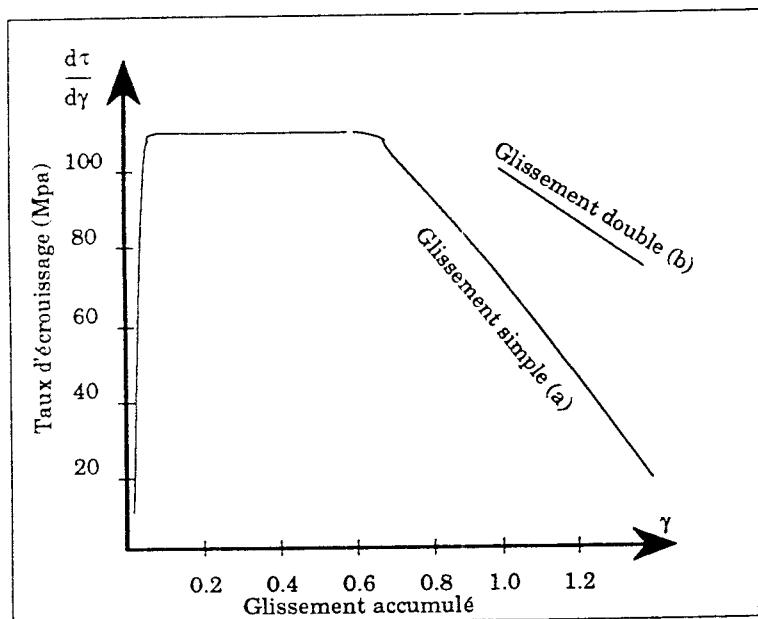


Figure 1.12: Détermination d'une courbe  $(d\tau/d\gamma, \gamma)$  en utilisant : a) uniquement les formules en glissement simple, b) les formules en glissement simple puis en glissement double. [BZ76]

### 1.3.5 Les essais de durcissement latent

#### Description

De nombreuses études ont porté sur l'écroissage des monocristaux : [JB76,Fra85, MFU77]. Une revue des différents travaux est effectuée par Michel et Champier [MC82]. Les essais de durcissement latent sont les plus pratiqués pour observer les phénomènes d'écroissage. Une distribution de dislocations primaires est créée par une traction sur une éprouvette monocristalline, puis l'essai est interrompu. L'éprouvette est alors découpée en petits échantillons. Ceux-ci sont à nouveau tirés, dans une autre direction, pour observer l'influence des dislocations primaires sur les dislocations qui seront activées lors de ce second essai. La grandeur caractéristique relevée est le rapport de durcissement latent (L.H.R.), c'est-à-dire le rapport de la contrainte seuil relevée lors du second essai ( $\tau_F$ ) sur la contrainte d'écoulement du système primaire à l'interruption de l'essai ( $\tau_P$ ).

Les essais mettent en évidence différents comportements en fonction de la nature des interactions entre le système primaire et le système secondaire (latent). Les interactions se classent selon que les dislocations en présence appartiennent à des systèmes :

- identiques
- coplanaires (même plan de glissement)
- colinéaires (même vecteur de Burgers)
- à vecteurs de Burgers perpendiculaires
- formant des jonctions glissiles
- formant des jonctions sessiles.

Quand les systèmes sont identiques, coplanaires, colinéaires ou à vecteurs de Burgers perpendiculaires, le taux de durcissement est environ égal à 1 ou légèrement supérieur. Lorsque les systèmes sont sécants et forment des jonctions (les deux derniers cas), les interactions sont fortes, et le rapport de durcissement latent est supérieur à 1. A faible taux de déformation, il peut atteindre une valeur proche de 4. Dans ce cas, certains auteurs trouvent que les contraintes  $\tau_F$  et  $\tau_P$  sont liées par la relation linéaire :

$$\tau_F = A\tau_P + B$$

A est typiquement compris entre 1 et 1,4 ; les valeurs de B varient entre 1 et 5 MPa. Il est intéressant de mettre cette équation sous la forme :

$$LHR = \frac{\tau_F}{\tau_P} = A + \frac{B}{\tau_P}$$

La figure 1.13 montre l'évolution du taux de durcissement latent entre systèmes

sécants obtenues par divers auteurs. Ces résultats ont été rassemblés par Michel et al [MC82]. Lorsque le taux de déformation est faible au cours du premier essai, le système primaire est seul actif. Les systèmes secondaires sont alors fortement écrouis. A plus fort taux de déformation primaire, des glissements s'opèrent sur d'autres systèmes que le système primaire et écrouissent celui-ci, entraînant ainsi la diminution du taux de durcissement latent.

La valeur de  $\tau_F$  en fonction de la densité  $\rho$  de dislocations forêts qui percent le plan de glissement des dislocations primaires a également été étudiée.  $\tau_F$  est proportionnelle à la racine carrée de  $\rho$  :

$$\tau_F = \alpha \mu b \sqrt{\rho},$$

où  $\alpha$  est un facteur géométrique qui prend en compte la nature des interactions entre les dislocations et de leur distribution.

### Rôle de l'énergie de faute d'empilement

L'énergie de faute  $E$  caractérise l'énergie créée par un défaut d'empilement des plans atomiques d'un cristal. Plus cette énergie est élevée, plus il est difficile d'avoir un défaut et moins les dislocations sont dissociées. La dissociation des dislocations joue un rôle important dans le comportement du matériau.

1. Dans les métaux à haute énergie de faute, les dislocations sont peu dissociées ; le durcissement isotrope obtenu expérimentalement signifie que les interactions entre dislocations d'un même système, via leur champ de contrainte à longue distance, est du même ordre de grandeur que les interactions de contact entre les dislocations de systèmes différents. A notre connaissance, il n'y a pas d'interprétation claire de ce phénomène.
2. Dans les métaux à basse énergie de faute, la forte dissociation des dislocations augmente la contribution des interactions de contact ; la consolidation sur les systèmes latents est plus importante.

Remarquons que pour les métaux à structure cubique centrée à basse énergie de faute, les dislocations vis sont également dissociées et que ces matériaux présentent également un durcissement anisotrope.

Pour différents matériaux cubiques à faces centrées, il est possible de tracer l'évolution de l'anisotropie d'écrouissage (représentée par les rapports de durcissement latent) en fonction de l'énergie de faute d'empilement pour différentes valeurs de prédéformation [Fra84] (voir figure 1.14). Cette représentation fait apparaître trois droites pour les trois types d'interactions considérées (faible, moyenne et forte). A partir de ces droites on peut définir deux paramètres :

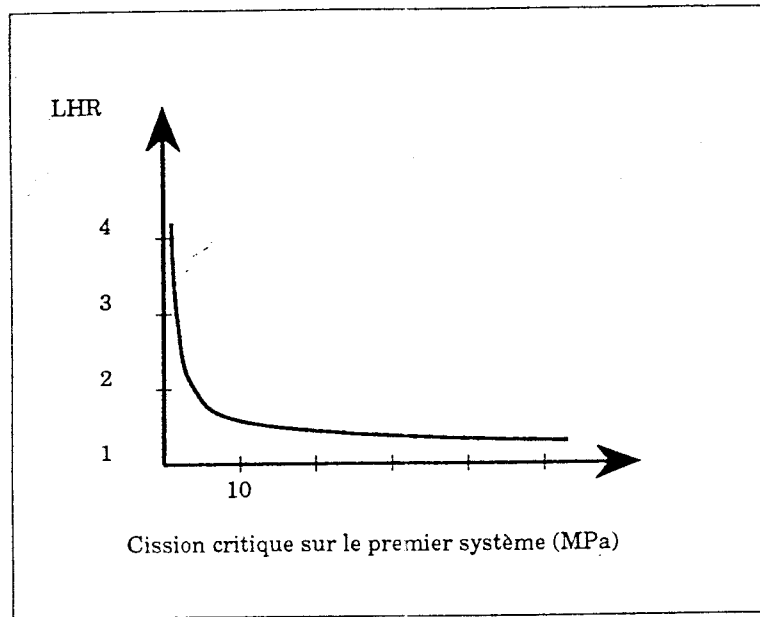


Figure 1.13: Evolution du taux de durcissement latent entre systèmes sécants en fonction de la cission sur le système primaire, cas du cuivre. [MC82]

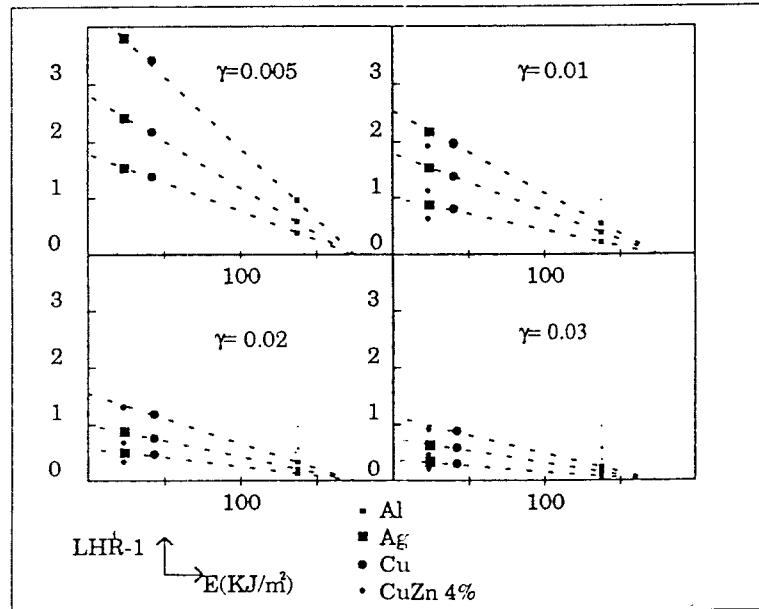


Figure 1.14: Variation de l'anisotropie de l'écaouissage en fonction de l'énergie de faute d'empilement E et pour diverses valeurs du glissement primaire. [Fra84]

- $E_M$ , énergie de faute d'empilement maximale, correspondant à un matériau isotrope (intersection du faisceau de droites avec l'axe des abscisses),
- $A_M^i$ , amplitude maximale de durcissement latent pour une énergie de faute nulle, pour le type d'interaction entre systèmes considérés (intersection de la droite considérée avec l'axe des ordonnées).

L'équation de ces droites peut se mettre sous la forme :

$$A^i(\gamma) = A_M^i(\gamma) \left(1 - \frac{E}{E_M}\right)$$

où :

- $i$  est le numéro du type d'interaction prise en compte,
- $\gamma$  est la quantité de glissement sur le premier système actif,
- $A_M^i(\gamma)$  est la valeur maximale du durcissement latent pour  $\gamma$  donné et à  $E = 0$ .

Cette énergie de faute influence également le seuil d'activation du glissement dévié et a donc une influence sur l'apparition du stade III.

### Remarques sur les essais de durcissement latent

On note que les résultats d'essais de durcissement latent sont souvent obtenus pour des petites déformations initiales lors de la prédéformation. Les valeurs que l'on obtient pour les rapports de durcissement latent ne sont pas significatives pour les essais à chargement monotone, comme l'essai de traction uniaxiale. Dans ce dernier cas, la microstructure s'établit progressivement sur un puis deux systèmes, à l'opposé de l'essai de durcissement, où on crée une structure initiale que l'on vient perturber en injectant artificiellement des dislocations d'un autre système. On trouve des matériaux, le cuivre et l'aluminium, par exemple, dont le comportement est isotrope en traction (déformation homogène en glissement double, stabilisation sur la zone de symétrie pour une traction à l'intérieur du triangle standard, pas d'"overshooting") alors que les essais de durcissement latent leur attribuent une anisotropie de comportement très marquées.

### 1.3.6 Autres essais

#### Introduction

D'autres essais que l'essai de traction ont été effectués sur les monocristaux, parmi les plus courants après celui-ci, se trouvent l'essai de cisaillement et l'essai de compression plane.

### Essai de cisaillement

L'intérêt de l'essai de cisaillement est que l'expérimentateur peut appliquer directement la contrainte de cisaillement sur le plan de glissement qu'il a choisi. A cause des extrémités libres de l'échantillon, la contrainte n'est pas homogène et la géométrie doit être adaptée pour minimiser les effets de bord. Peu de résultats sont rapportés dans la littérature ([RHB90,Roc76]).

### Essai de compression plane

Orlans-Joliet [Orl89] a utilisé l'essai de compression plane partiellement imposée qui consiste à imposer une déformation de compression suivant l'axe  $x_3$  à un échantillon qui s'allonge suivant la direction  $x_2$ , en empêchant la déformation suivant  $x_1$  (voir figure 1.15). Parallèlement, le comportement de monocristaux cubiques centrés soumis à une compression plane est simulé de façon satisfaisante à l'aide du modèle de Taylor-Bishop-Hill [RW87]. Il faut noter que la forte hétérogénéité de déformation observée à grands taux de déformation atténue la portée des comparaisons ainsi faites.

## 1.4 Description de la plasticité du monocristal

### 1.4.1 Introduction

La description de la plasticité du monocristal se fait au moyen de deux lois : une loi d'écoulement pour la détermination de l'activité sur les systèmes et une loi d'écrouissage pour le durcissement qui s'opère sur chaque système suite à un glissement. On distingue deux voies pour aborder l'écoulement du monocristal. La première, de type "plastique", simple dans sa formulation, implique l'utilisation de critères sophistiqués pour lever les indéterminations mathématiques rencontrées lors d'un glissement multiple. La seconde, d'apparence plus compliquée dans sa formulation est de type "élastoviscoplastique" et ne provoque jamais d'indéterminations.

### 1.4.2 Lois d'écoulement plastique

#### Écoulement plastique

La cission résolue est calculée conformément à l'équation (1.1) et l'écoulement est supposé se produire ( $\dot{\gamma}^{(s)} > 0$ ) si les conditions de l'équation (1.2) sont remplies. Chaque égalité ( $\tau^{(s)} = \tau_C^{(s)}, \forall s$ ) définit un hyperplan dans l'espace des contraintes. L'ensemble de ces hyperplans constitue la surface de plasticité. Lorsque le point représentatif de l'état de contrainte se trouve sur une arête ou un sommet de cette surface, plusieurs systèmes sont simultanément actifs et leurs vitesses de glissement sont indéterminées. Les modèles qui font usage de cette description proposent conjointement divers critères pour lever les indéterminations éventuelles.



### Écoulement viscoplastique

Cette formulation ne crée pas d'indéterminations sur les vitesses de glissement des systèmes. Les lois proposées sont définies pour des cissions réduites  $\tau^*$  modérées pour lesquelles le glissement est contrôlé par les obstacles, c'est-à-dire pour  $0,1 < \tau^*/\tau_0^* < 0,7$  (voir page 8). Une forme simple de loi visqueuse avec seuil est, par exemple, une loi de Bingham :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = a_B^{(s)} \langle \tau^{(s)} - \tau_C^{(s)} \rangle,$$

où  $a_B^{(s)}$  est une constante pour chaque système ( $s$ ) et la fonction  $\langle \cdot \rangle$  est définie par :  $\langle x \rangle = x$  si  $x \geq 0$  et  $\langle x \rangle = 0$  sinon.

Il existe une loi à seuil [Teo75], inspirée par la théorie du mouvement thermiquement activé des dislocations :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = a_t^{(s)} \exp\left(\frac{-\Delta g}{kT}\right) \exp\left(\frac{(\tau^{(s)} - \tau_C^{(s)})\Delta V}{kT}\right) \quad (1.7)$$

où  $\Delta V$  est le volume d'activation,  $k$  la constante de Boltzman et  $\Delta g$ , l'enthalpie d'activation à contrainte nulle. Pour les applications numériques, il est pratique de représenter cette relation, par la loi puissance<sup>2</sup> :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = a \left( \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right) \left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right|^{c-1},$$

où un système est actif dès que  $\tau^{(s)} > 0$ . Pour les valeurs adoptées pour  $a$  et  $c$  (respectivement  $10^{-3}$  et 100), les vitesses d'écoulement sont très faibles lorsque  $\tau^{(s)} < \tau_C^{(s)}$  que l'on peut considérer comme une cission critique.

Que la loi soit de type plastique ou viscoplastique, il faut expliciter les lois d'évolution des cissions critiques pour décrire l'écroutissage du matériau. On recense plusieurs démarches plus ou moins physiques selon les variables utilisées.

Chang et al [CA81], Weng et al [Wen87,WP77], Cailletaud et al [CNP88,Cai87] ont développé des modèles phénoménologiques, qui utilisent les quantités de glissement comme variables d'écroutissage.

Dans les travaux plus récents de Franciosi [Fra84,Fra85] et de Teodosiu [TSR89], l'écroutissage du matériau est formulé en fonction de variables internes : densités de dislocations et paramètres de structure. L'état du matériau est totalement déterminé par les valeurs prises par ces variables. La simulation des essais de changement de trajet de chargement d'une éprouvette est envisageable avec ces modèles (effet Bauschinger notamment). En dernière partie, nous rapportons la tentative effectuée par Mecking et al : [MK81,ME87,EM84] pour décrire de manière unifiée avec un seul paramètre la plasticité des monocristaux en traction uniaxiale.

---

<sup>2</sup>Bien qu'obtenue par une approximation de l'équation (1.7), en faisant tendre  $\tau^{(s)}$  vers  $\tau_C^{(s)}$  avec  $\tau^{(s)} > \tau_C^{(s)}$ , la loi puissance est utilisée,  $\forall \tau^{(s)}$ . Malgré cette extension en contradiction avec les hypothèses initiales, on obtient des résultats numériques en agrément avec le comportement du matériau.

### 1.4.3 Lois d'écrouissage

**Lois phénoménologiques formulées à partir de quantités de glissement accumulées sur les systèmes**

Mandel [Man65], dès 1965, propose une loi de durcissement de la forme :

$$\dot{\tau}_C^{(s)} = \sum_u h^{(su)} |\dot{\gamma}^{(u)}|$$

avec la condition initiale  $\tau_C^{(s)} = \tau_{C0}^{(s)}$  pour  $\gamma^{(s)} = 0$ . Les modules physiques d'écrouissage  $h^{(su)}$  forment par définition la matrice d'écrouissage et dépendent de la somme des quantités de glissement de tous les systèmes de glissement  $\gamma_{\text{tot}}$  :

$$h^{(su)} = h^{(su)}(\gamma) \quad , \quad \gamma_{\text{tot}} = \int_0^t \sum_s |\dot{\gamma}^{(s)}| dt$$

Cette forme est largement utilisée et plusieurs auteurs ont proposé différentes formes de la matrice d'écrouissage. Il est intéressant de noter qu'une loi de cette forme mais avec  $h^{(su)} = h_0$ ,  $\forall s, u$  correspondant à un écrouissage isotrope, a été proposée dans les années trente par Taylor.

Chang et Asaro [CA81] ont identifié les relations suivantes pour des monocristaux d'aluminium-cuivre :

$$\begin{aligned} h^{(su)} &= h \text{ si } s = u \\ h^{(su)} &= qh \text{ si } s \neq u \\ h(\gamma) &= h_0 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{h_0 \gamma_{\text{tot}}}{\tau_{\text{sat}} - \tau_0} \right) \end{aligned}$$

$q$  est une constante valant entre 1 et 1,4. Une bonne correspondance avec les résultats expérimentaux est obtenue pour  $h_0 = 8,9\tau_0$ ,  $\tau_{\text{sat}} = 1,8\tau_0$  et  $\tau_0 = 61\text{MPa}$ . Cette loi a été reprise dans plusieurs simulations sur les monocristaux [MOS89,PAN82, NALP85]

Weng [Wen87,WP77] propose un modèle qui prend en compte l'effet des structures de dislocations créées pendant la déformation plastique :

$$d\tau_C^{(s)} = \sum_{q=1}^n g^{(sq)} d\tau^{(q)}$$

où  $n$  est le nombre des systèmes actifs ;  $d\tau^{(q)}$  est l'accroissement de la contrainte d'écoulement ou auto-durcissement.  $g^{(sq)}$  sont les coefficients de durcissement latent obtenus à partir de paramètres géométriques :

$$g^{(sq)} = \alpha_1 + (1 - \alpha_1) \cos\theta^{(sq)} \cos\phi^{(sq)} + \alpha_2 \sin\theta^{(sq)} + \alpha_3 \sin\phi^{(sq)}$$

- $\theta^{(sq)}$  angle entre les directions de glissement des systèmes (s) et (q) ;
- $\phi^{(sq)}$  angle entre les normales des plans de glissement des systèmes (s) et (q) ;
- $\alpha_i$   $i=1,3$  sont des constantes à identifier expérimentalement.

La forme de cette relation a été déterminée d'après les observations suivantes :

lorsque les directions de glissement ou les normales aux plans de glissement de deux systèmes sont perpendiculaires entre elles, le glissement sur l'un des deux systèmes ne provoque pas d'écrouissage sur l'autre

lorsque les directions de glissement ou les normales aux plans de glissement de deux systèmes ne sont ni perpendiculaires entre elles, ni coplanaires, le glissement d'un des deux systèmes provoque un écrouissage latent sur l'autre système plus important que l'auto-écrouissage.

il existe une différence de comportement suivant le sens d'activation du système de glissement (effet Bauschinger)

Cette relation se réduit pour des cas particuliers classiques :

1. totalement isotrope :  $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = \alpha_3 = 0$
2. totalement cinématique :  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 0$
3. durcissement isotrope pour les systèmes coplanaires et durcissement plus fort pour les systèmes sécants :  $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 0, \alpha_3 = 0, 3$  ou  $0, 5$ .

Ces valeurs déterminent différents comportements que l'on visualise en considérant les variations d'une coupe surface de plasticité d'un monocristal soumis à un état plan de contrainte. La figure 1.16 a été obtenue pour les trois cas ci-dessus.

Les formules suivantes sont utilisées par Weng pour relier les coefficients  $g^{(sq)}$  aux coefficients de la matrice d'écrouissage  $h^{(sq)}$

$$\begin{aligned} h^{(sq)} &= g^{(sq)} h^{(qq)} \text{ (pas de somme)} \\ h^{(qq)} &= \left( 1 + \sum_{p=1}^N g^{(qp)} \right) h^{(\gamma^{(q)})} \text{ (pas de somme sur q)} \end{aligned}$$

où  $h^{(\gamma^{(q)})}$  est obtenue à partir d'expériences en glissement simple.

Cailletaud [CNP88,Cai87] propose un modèle pour simuler le comportement anisotrope viscoplastique des monocristaux en s'inspirant des lois macroscopiques d'écrouissage et d'écoulement. La loi de d'écoulement utilisée pour chaque système est la suivante :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \left\langle \frac{|\tau^{(s)} - x^{(s)}| - r^{(s)} - k^{(s)}}{K} \right\rangle^n \text{ signe}(\tau^{(s)} - x^{(s)})$$

où :

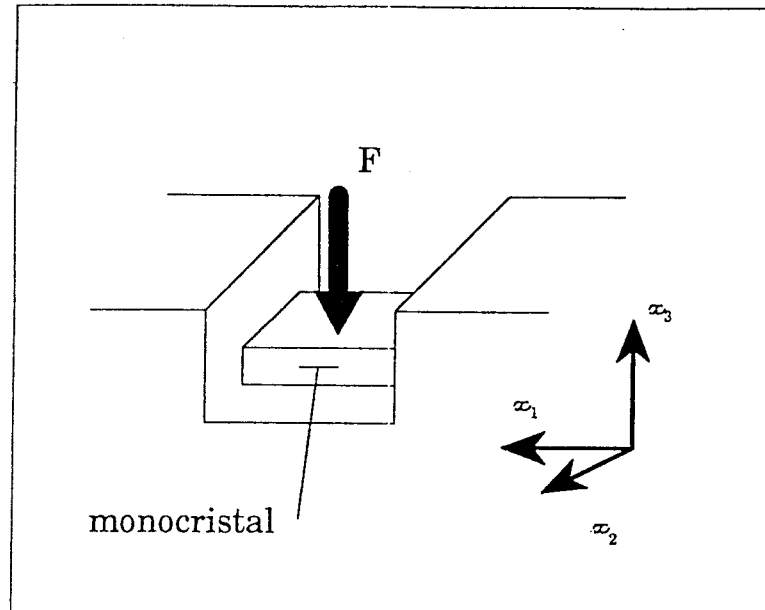
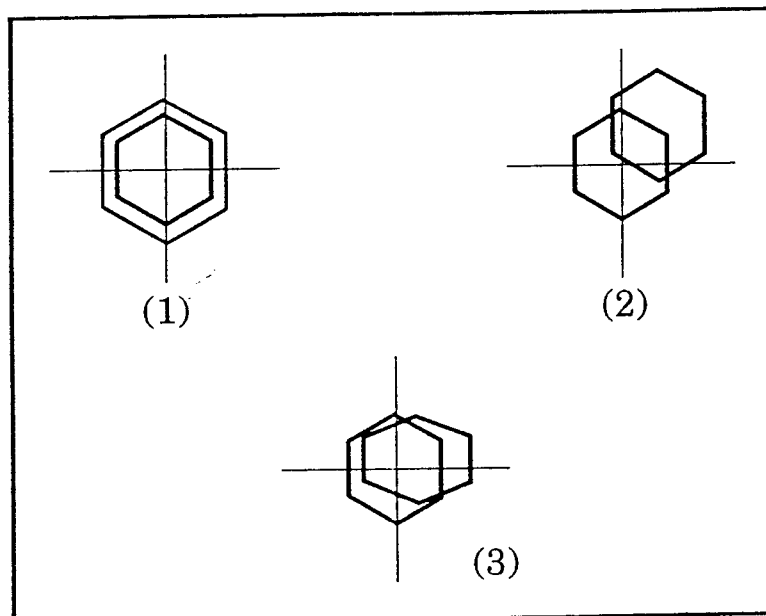


Figure 1.15: Schéma du dispositif de compression plane



1) isotrope 2) cinématique 3) isotrope-coplanaire ; anisotrope-sécants

Figure 1.16: Quelques cas pris en compte par la loi de durcissement proposée par Weng. [Wen87]

- $k^{(s)}$  est la cission critique initiale du système ( $s$ ),
- $r^{(s)}$  est une variable d'écroissage isotrope,
- $x^{(s)}$  est une variable d'écroissage cinématique.

La décomposition de l'écroissage est illustrée sur la figure 1.17 lorsque l'écroissage cinématique est linéaire. On met ainsi en évidence les deux valeurs de la cission critique définissant les limites du domaine élastique :

$$\begin{cases} \tau_C^{(s)+} = x^{(s)} + r^{(s)} + k^{(s)} \\ \tau_C^{(s)-} = x^{(s)} - r^{(s)} - k^{(s)} \end{cases}$$

La loi d'évolution de  $r^{(s)}$  a la forme suivante :

$$\dot{r}^{(s)} = \sum_q bQg^{(sq)} \exp(-b\theta^{(q)}) |\dot{\gamma}^{(q)}|$$

$b$ ,  $Q$  et  $g^{(sq)}$  sont des coefficients dépendant du matériau,  $\theta^{(s)}$  est la quantité de glissement accumulée sur le système ( $s$ ) :

$$\theta^{(s)} = \int_0^t |\dot{\gamma}^{(s)}| dt$$

La loi d'évolution de  $x^{(s)}$  prend l'une des deux formes suivantes :

$$\begin{aligned} \dot{x}^{(s)} &= c\dot{\gamma}^{(s)}, \\ \dot{x}^{(s)} &= c\dot{\gamma}^{(s)} - dx^{(s)}|\dot{\gamma}^{(s)}|. \end{aligned}$$

En faisant l'hypothèse d'un glissement simple et dans le cas d'un écroissage isotrope, on obtient explicitement la fonction  $r^{(s)}$  et sa dérivée par rapport à la quantité de glissement accumulé :

$$\begin{aligned} r^{(s)} &= Q(1 - \exp(-b\gamma^{(s)})) \\ \frac{dr^{(s)}}{d\theta^{(s)}} &= bQ(1 - r^{(s)}/Q) = b(Q - r^{(s)}) \end{aligned}$$

La courbe  $dr^{(s)}/d\gamma^{(s)}$  en fonction de  $r^{(s)}$  en supposant le glissement d'un seul système fait apparaître un comportement de stade III (voir figure 1.18).

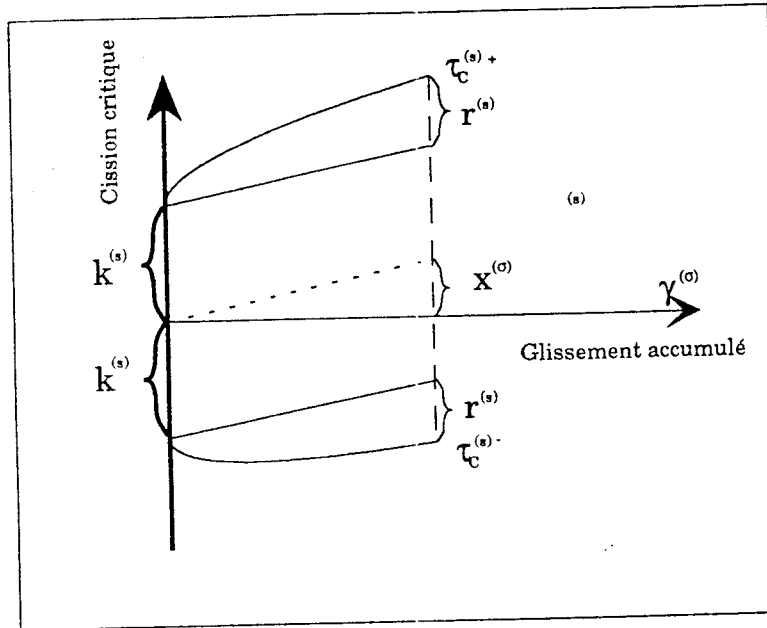


Figure 1.17: Courbe  $(\tau, \theta)$  pour un seul système actif, dans le cas d'un écouissage cinématique linéaire obtenue avec les lois de Cailletaud

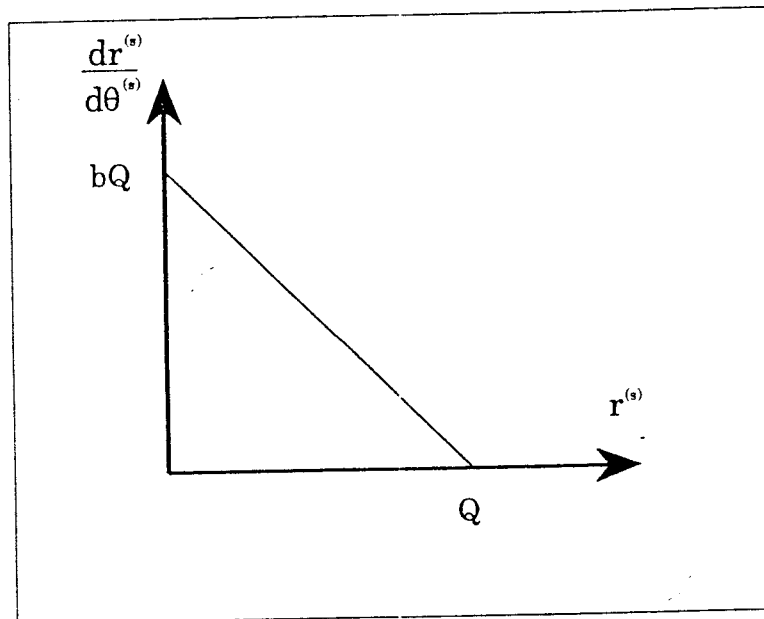


Figure 1.18: Courbe d'écrouissage  $dr/d\theta$  en fonction de  $r$  en glissement simple dans le cas d'un écouissage isotrope, obtenue avec les lois proposées par Cailletaud

## Les approches physiques

Franciosi [Fra84,Fra85] donne une description de la plasticité des monocristaux fondée sur l'analyse microstructurale des densités de dislocations. La relation utilisée pour la détermination de la cission critique est de forme quadratique en  $\sqrt{\rho}$  :

$$\tau_C^{(s)} = \mu b \left( \sum_{q=1}^N a^{(sq)} \rho^{(q)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$a^{(sq)}$  est la matrice d'interactions dont les coefficients dépendent des différentes interactions entre dislocations. La cission critique s'exprime :

$$\tau_C^{(s)} = \mu b \left( \sum_{q=1}^N a^{(sq)} (\rho_0^{(q)} + \rho_M^{(q)} + \rho_J^{(q)}) \right)^{\frac{1}{2}},$$

et sous forme incrémentale :

$$\dot{\tau}_C^{(s)} = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_C^{(s)}} \sum_{q=1}^N a^{(sq)} (\dot{\rho}_M^{(q)} + \dot{\rho}_J^{(q)})$$

avec,

- $\rho_0$  : densité initiale,
- $\rho_M$  : densité de dislocations mobiles sous contraintes,
- $\rho_J$  : densité de jonctions.

La densité des dislocations mobiles est représentée par la loi suivante :

$$\rho_M^{(s)} = \rho_{max} \exp \left( -\beta \left( \frac{\tau_C^{(s)}}{\tau^{(s)}} \right)^2 - 1 \right)$$

qui s'inspire de la fonction de percolation utilisée par Kocks [Koc66] pour déterminer si il existe un chemin franchissable pour les dislocations considérées.

L'expression de la densité de jonctions<sup>3</sup> est déterminée en supposant que les jonctions créées par chaque paire (h,k) de systèmes sur le système l sont proportionnelles au produit des densités totales de boucles créées sur les deux systèmes h et k :

$$\rho_J^{(s)} = \sum_p^{N_t} \sum_q^{N_t} K^{(spq)} \rho_{Mtot}^{(p)} \rho_{Mtot}^{(q)}$$

<sup>3</sup>Franciosi utilise également une autre expression de la densité de jonctions [Fra87] :

$$\rho_J^{(s)} = \sum_p^{N_t} \sum_q^{N_t} K^{(spq)} ((\rho_{Mtot}^{(p)} - \rho_M^{(p)}) \rho_{Mtot}^{(q)} - \rho_0)$$

où  $\rho_0$  est la densité initiale de dislocations sur chaque système.

où  $K^{(spq)}$  est un facteur de proportionnalité déterminant la fréquence de création des jonctions pour les deux systèmes  $(p)$  et  $(q)$ .  $\rho_{Mtot}^{(p)}$  et  $\rho_{Mtot}^{(q)}$  sont les densités totales de boucles créées au cours de la déformation. Pour cette densité de jonctions, Franciosi propose l'expression :

$$\dot{\rho}_{Mtot}^{(s)} = \dot{\rho}_M^{(s)} + A\dot{\gamma}^{(s)}$$

L'expression de la cission critique peut être alors obtenue :

$$\dot{\tau}_C^{(s)} = \sum_{q=1}^N (A^{(sq)}\dot{\tau}^{(q)} + B^{(sq)}\dot{\gamma}^{(q)}) \quad (1.8)$$

avec :

$$A^{(sq)} = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_C^{(s)}} a^{(sq)} \frac{\partial \rho_M^{(q)}}{\partial \tau^{(q)}}$$

$$B^{(sq)} = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_C^{(s)}} \sum_{p=1}^{N_t} a^{(sp)} \frac{\partial \rho_J^{(p)}}{\partial \gamma^{(q)}}$$

On ne retrouve pas la matrice d'écroissage  $h^{(sq)}$  mais deux matrices  $A$  et  $B$  liées à l'écroissage du système  $(s)$  qui sont respectivement dues aux dislocations créées par l'action de la contrainte  $\tau$  et aux jonctions créées sur tous les systèmes par le glissement des dislocations du système  $(s)$ . La simulation de la micro-plasticité due à l'activation des grands segments de dislocations sous faible contrainte est rendue possible grâce au premier terme de la relation (1.8).

Teodosiu et al [TSR89] proposent une loi d'écroissage pour décrire la viscoplasticité du monocristal à l'aide de paramètres internes : les densités de dislocations. La cission critique est prise de la forme :

$$\tau_C^{(s)} = \mu b \left( \sum_q a^{(sq)} \rho^{(q)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

d'une manière similaire à Franciosi. Les lois d'évolution des densités de dislocations sont données par :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = b\dot{\rho}^{(s)}L^{(s)},$$

relation obtenue à partir de la relation d'Orowan dans le cas où le taux d'annihilation est considéré négligeable et pour un mouvement quasi-stationnaire des dislocations (la densité des dislocations mobiles est supposée constante). La démonstration de cette relation est effectuée par Teodosiu [Teo75].  $L^{(s)}$  est le libre parcours moyen, c'est-à-dire, la distance de parcours moyenne d'une dislocation avant son immobilisation finale. Pour des taux de déformation pas trop importants et en chargement monotone, la dépendance entre libre parcours moyen  $L^{(s)}$  et densités de dislocations est exprimée par :

$$\left( \frac{1}{L^{(s)}} \right)^2 = \sum_q K^{(sq)} \rho^{(q)}$$



où  $K^{(s)}$  est une matrice d'interaction entre les différents systèmes. La vitesse de production des dislocations sur le même système ( $s$ ) est considérée comme fonction de la différence  $\tau^{(s)} - \tau_C^{(s)}$  et de  $T$ , la température absolue.

$$\dot{\rho}^{(s)} = f(\tau^{(s)} - \tau_C^{(s)}, T)$$

Mecking et al [MK81,ME87,EM84] proposent un traitement phénoménologique de la déformation plastique pour décrire de manière unifiée la plasticité d'un matériau en traction monotone uniaxiale. Ce traitement suppose l'existence d'un paramètre unique pour déterminer l'état mécanique du matériau. Les auteurs interprètent la valeur de ce paramètre comme la densité totale de dislocations  $\rho$  à l'intérieur du matériau. La contrainte macroscopique unidimensionnelle d'un essai de traction est liée à ce paramètre via :

$$\sigma = \alpha G b \rho^{\frac{1}{2}}$$

pour un matériau monophasé, dont les dislocations sont réparties aléatoirement, le taux de production est donné par :

$$\left(\frac{d\rho}{d\epsilon}\right)^+ = k_1 \rho^{\frac{1}{2}}.$$

Le mécanisme prépondérant dans l'adoucissement est supposé obtenu principalement par glissement dévié des dislocations. Cette hypothèse suggère un taux de production de la forme :

$$\left(\frac{d\rho}{d\epsilon}\right)^- = k_2 \rho.$$

L'équation d'évolution est donnée par :

$$\frac{d\rho}{d\epsilon} = k_1 \rho^{\frac{1}{2}} - k_2 \rho. \quad (1.9)$$

$k_1 \rho^{\frac{1}{2}}$  est associé à l'accumulation de dislocations, tandis que le terme  $k_2 \rho$  est relié à l'annihilation. En combinant ces deux équations, on obtient une description de la déformation plastique :

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = \Theta_0 \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_s}\right)$$

où  $\Theta_0$  denote la pente de la courbe contrainte-déformation.  $\Theta_0$  et  $\sigma_s$  ont les expressions suivantes :

$$\Theta_0 = \frac{1}{2} \alpha G b k_1, \quad \sigma_s = \alpha G b (k_1/k_2)$$

L'analyse des courbes  $(d\sigma/d\epsilon, \sigma)$  simulées démontre que ce modèle décrit avec succès les stades II et III du monocristal. La valeur de  $\Theta_0$  est interprétée comme étant la pente initiale en stade II. Pour différents modes de durcissement et d'adoucissement en compétition lors de la déformation, les auteurs proposent également une méthode d'identification de  $k_1$  et  $k_2$ .

### 1.4.4 Commentaires

Les premières représentations de l'écrouissage que nous avons présentées, dont les auteurs sont des mécaniciens, font appel à des paramètres (les glissements accumulés) qui ne sont pas liés aux aspects microstructuraux de la déformation plastique. Ces formulations ne rendent pas compte des processus microscopiques et parviennent à décrire le comportement du matériau grâce à l'ajustement d'un grand nombre de paramètres. Cette façon de procéder ne donne pas la possibilité de les extrapoler fidèlement au delà des conditions expérimentales pour lesquelles les paramètres ont été identifiés.

C'est pourquoi la science des matériaux tente d'apporter une réponse plus pertinente en proposant des modèles physiques où les paramètres (essentiellement des densités de dislocations) sont liés à l'évolution de la microstructure. De ce point de vue, le modèle de Franciosi qui fait intervenir de nombreux aspects physiques en considérant notamment l'évolution des densités de jonctions est très complet. Cependant, il est également très complexe et comporte de nombreux paramètres à identifier. La dernière démarche montre que les aspects classiques (différents stades de déformation) de l'écrouissage des monocristaux métalliques peuvent être simulés par un modèle constitutif très simple, utilisant un seul paramètre interne : la densité totale de dislocations. Ceci est rendu possible par l'introduction dans le modèle d'équations qui représentent l'évolution de ce paramètre en agrément avec les aspects microstructuraux considérés. Bien que incomplète, cette formulation donne l'architecture des modèles futurs. Il est possible de déterminer un modèle moins limitatif en considérant les densités de dislocations de chaque système tout en conservant un nombre limité d'équations descriptives comme le font Teodosiu et al [TSR89].

Les déformations du monocristal en fonction des conditions d'essais imposées se déterminent en intégrant les équations d'équilibre de la mécanique des milieux continus dans lesquels sont introduites les lois de comportement. Toute simulation de comportement s'effectue grâce à un tel processus. Dans la partie suivante on présente les divers formalismes mécaniques qui ont été adoptés pour le monocristal et la résolution de divers problèmes aux limites correspondant à des conditions expérimentales réelles.

## 1.5 Solutions de divers problèmes aux limites

Lorsque la déformation plastique d'un monocristal se fait par glissements cristallographiques, les paramètres qui caractérisent la déformation sont :

- la vitesse de glissement sur le système ( $s$ ) :  $\dot{\gamma}^{(s)}$
- l'orientation cristalline
- les changements de forme macroscopique

Pour déterminer les différents paramètres au cours de la déformation, on fait souvent appel à des hypothèses restrictives qui conduisent à différents traitements des problèmes :

- monocristal infiniment rigide (parfaitement plastique)
- petites déformations
- pas d'évolution l'orientation cristalline
- déformations et contraintes homogènes
- matériau visqueux ou non
- traitement de cas particulier plan (contraintes et déformations planes)

Dans le cas d'un monocristal rigide-plastique en déformation homogène, on distingue les cas où les déformations sont totalement imposées (conditions de type Taylor) ou partiellement imposées (conditions de type Taylor relâché).

### 1.5.1 Conditions aux limites de type Taylor

Dans de nombreuses expériences, le monocristal subit des déformations imposées. L'incrément de déformation plastique subit par le matériau est écrit (en négligeant la partie élastique du tenseur de déformation) :

$$d\epsilon_P = \sum_{s=1}^N M^{(s)} d\gamma^{(s)}$$

où la sommation est effectuée sur l'ensemble des systèmes de glissement. Cette équation représente, compte tenu de la conservation de volume au cours de la déformation, cinq équations pour N inconnues. Pour différentes combinaisons de cinq systèmes de glissement, les sous-systèmes (5x5) correspondants peuvent être résolus. Il suffit de cinq systèmes indépendants pour accommoder une déformation imposée. Taylor a proposé dès 1938 que l'on retienne comme solution possible, les cinq systèmes qui minimisent le travail des forces intérieures :

$$\sum_s |d\gamma^{(s)}| \tau_C^{(s)}.$$

Dans certains cas, il existe plusieurs quintuplés de solutions satisfaisant la condition de Taylor (plus de cinq hyperplans s'interceptant au même point de la surface). La solution est indéterminée.

### 1.5.2 Conditions aux limites de type Taylor relâché

Dans le cas de grains plats, on suppose que les quantités de cisaillement dans le plan du grain sont négligeables. Les composantes de déformation correspondant à ces cisaillements simples sont relâchées. Il suffit alors de 3 systèmes de glissement au lieu de 5 systèmes pour accommoder la déformation.

Il faut noter que les conditions de type Taylor et de type Taylor relâché sont plus utilisées pour la prédiction des textures que pour les déformations du monocristal. Des calculs similaires sont effectués lorsque les conditions imposées sont mixtes (soit un déplacement soit une contrainte est imposée). Il faut alors considérer une coupe de la surface de plasticité dans le sous espace des contraintes non-imposées [KCJ83]. Cette analyse a été appliquée avec succès au cas de la déformation par compression de monocristaux [Orl89,DSW83].

### 1.5.3 Monocristal plan

Boukadia [Bou90,BS87] considère le cas du monocristal cubique à faces centrées dans un état plan de contraintes et de déformations. L'étude est faite notamment pour le cisaillement simple en grandes transformations.

$$[F] = \begin{pmatrix} 1 & \gamma & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad [T] = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \tau & 0 \\ \tau & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Pour assurer la compatibilité entre ces deux tenseurs, il faut que le plan  $x_1x_2$  soit un plan de symétrie, ce qui est le cas si les axes  $x_1, x_2, x_3$  liés à l'éprouvette sont colinéaires aux directions  $[001], [1\bar{1}0]$  et  $[110]$  (voir figure 1.19). Conformément au modèle mécanique général en grandes transformations (sans prise en compte de l'élasticité) et en supposant que la symétrie plane se conserve (deux systèmes symétriques par rapport au plan  $x_1x_2$  glissent de façon identique), la rotation de réseau est une rotation plane :

$$[R] = \begin{pmatrix} \cos \eta & \sin \eta & 0 \\ -\sin \eta & \cos \eta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Les auteurs calculent analytiquement les vitesses de glissement plastique, la contrainte de cisaillement  $\tau$  et l'évolution de la rotation cristalline (voir figure 1.20 et figure 1.21). L'étude est faite dans le cas rigide-plastique ou rigide-viscoplastique. Dans le cas rigide-plastique, il existe des indéterminations lorsque le point figuratif de l'état de contrainte se situe sur une arête de la surface de plasticité.

### 1.5.4 Les démarches utilisant la méthode des éléments finis

Ohashi [Oha87,Oha86] analyse, grâce à la méthode des éléments finis, les contraintes élastiques locales qui se produisent aux frontières de grains. Son modèle

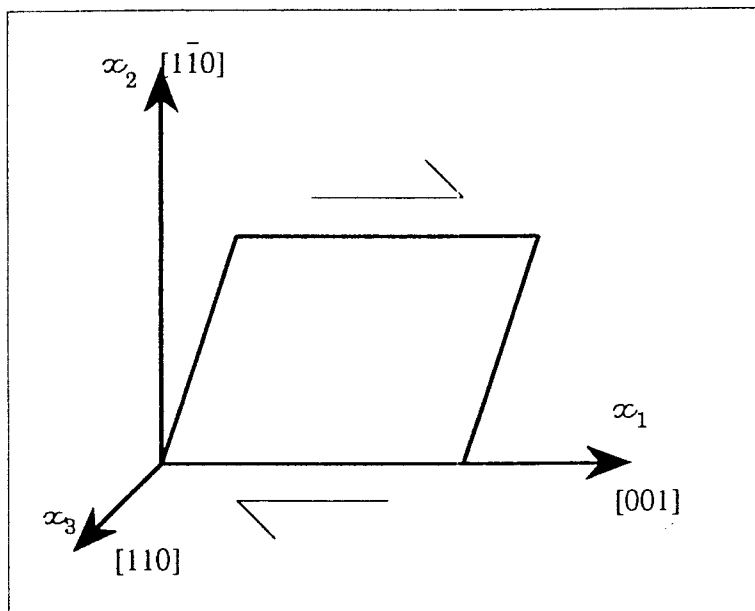
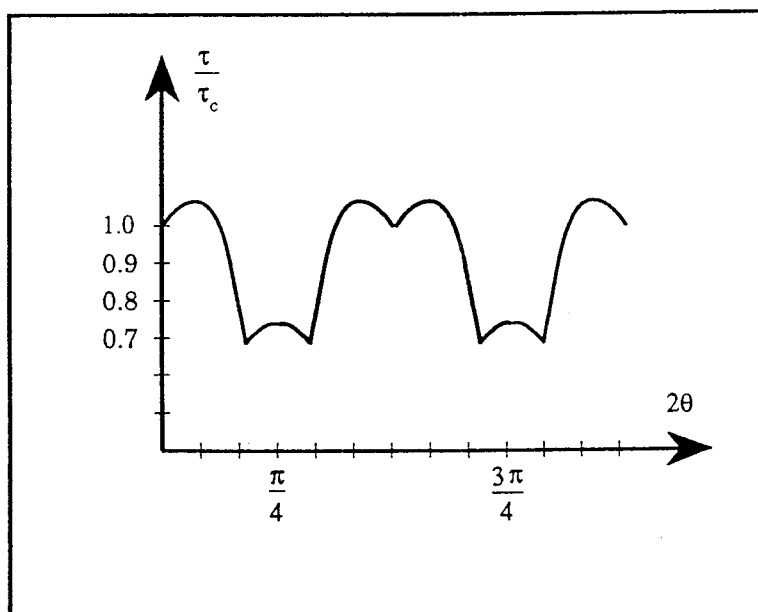


Figure 1.19: Représentation des axes liés à l'éprouvette

Figure 1.20: Evolution du rapport de la contrainte  $\tau$  sur la cission critique  $\tau_0$  en fonction de l'angle  $\eta$  de la rotation du réseau

prend en compte la nature cristallographique du monocristal et son écrouissage via la relation :

$$\tau_C^{(s)} = \tau_0 + \sum_{s=1}^{12} h^{(sq)} F(\gamma^{(q)}),$$

où  $F(\gamma^{(q)})$  est une fonction du glissement accumulé sur chaque système qui est elle-même corrélée avec les densités de dislocations de chaque système ( $q$ ) tandis que  $h^{(sq)}$  décrit l'intensité des interactions entre les dislocations des systèmes bloqués et les systèmes actifs.

L'auteur néglige dans les équations cinématiques les rotations cristallines dues à l'activité des systèmes de glissement. Cette hypothèse restrictive limite le champ des simulations possibles pour les monocristaux pour lesquels la rotation du réseau est souvent importante.

Pierce, Needleman et Asaro [NALP85,PAN83,PAN82] ont présenté un modèle mécanique du monocristal et ont utilisé la méthode des éléments finis avec un maillage à deux dimensions pour intégrer leurs équations. La déformation est décomposée (voir figure 1.22) en une partie plastique n'entraînant pas de changement d'orientation du réseau cristallographique, et une partie élastique :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_E \mathbf{F}_P$$

Le gradient  $\mathbf{F}$  de déformation est le produit d'un tenseur  $\mathbf{F}_E$  inhérent à la distorsion et la rotation de réseau cristallographique et d'un tenseur gradient de déformation plastique  $\mathbf{F}_P$  uniquement dû aux glissements de dislocations. La relation utilisée pour calculer les vitesses de cisaillement  $\dot{\gamma}^{(s)}$  sur les systèmes est une loi puissance :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = a \left( \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right) \left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right|^{\frac{1}{m}-1}$$

où  $\tau^{(s)}$  est la cission résolue :

$$\tau^{(s)} = \boldsymbol{\tau} : (\mathbf{g}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)})$$

$\boldsymbol{\tau}$  est le tenseur des contraintes de Kirchhoff.  $\tau_C^{(s)}$  est la cission critique calculée selon la loi d'écrouissage proposée par Chang et Asaro (voir page 29).

En formulation incrémentale, on suppose connu un état d'équilibre au temps  $t$  ; le principe des puissances virtuelles permet de déterminer l'état au temps  $t+\Delta t$ . L'utilisation de ce principe nécessite alors une relation entre la dérivée du tenseur de Kirchhoff  $\dot{\boldsymbol{\tau}}$  et le tenseur vitesse de déformation  $\mathbf{D}$ . Pour augmenter la stabilité du procédé par rapport à une intégration de type Euler qui ne fait intervenir que les grandeurs à l'instant  $t$ , Pierce [PSN84] emploie une méthode qui fait appel au calcul d'un module sécant, calculé à partir d'une estimation des vitesses de glissement à l'instant  $t+\Delta t$ . Cette méthode appelée "Forward Gradient" a été utilisée

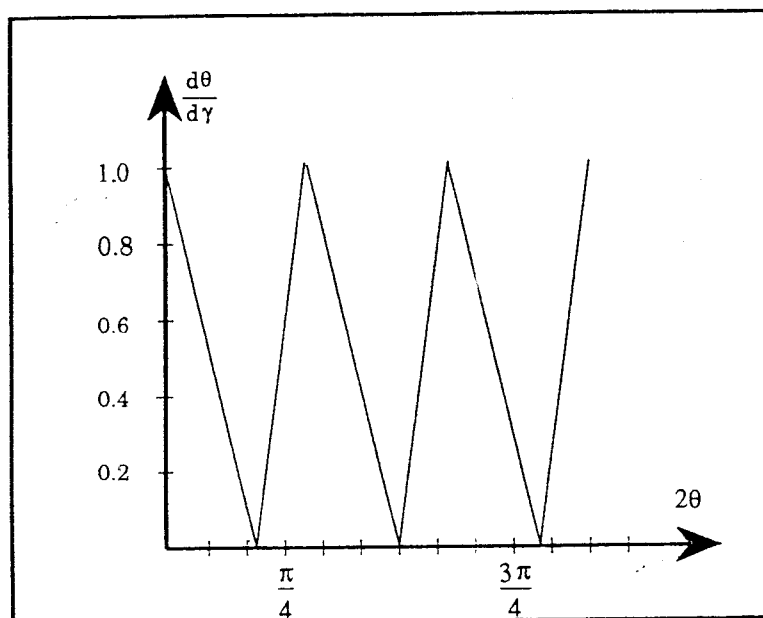


Figure 1.21: Evolution de la dérivée de l'angle de rotation  $\eta$  de la rotation du réseau par rapport à  $\gamma$ , en fonction de l'angle  $\eta$

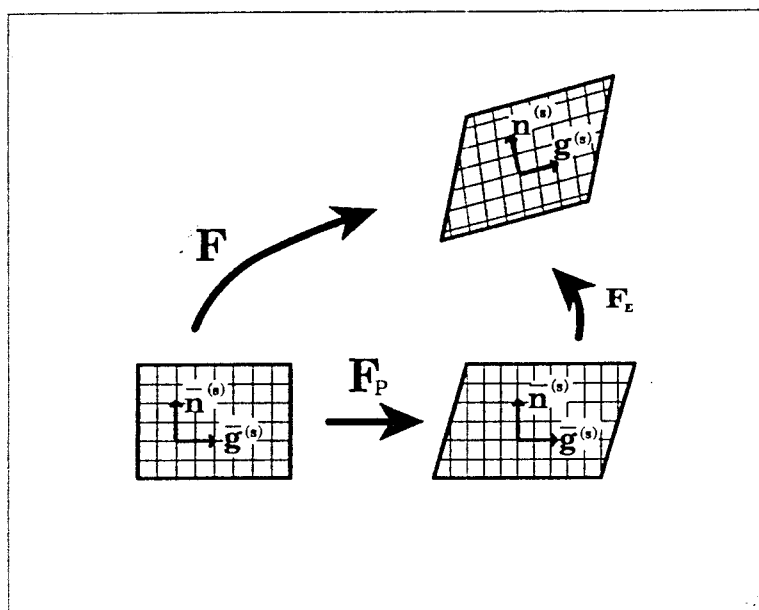


Figure 1.22: Définition des grandeurs cinématiques utilisées par Pierce et al. [PAN82]

dans notre schéma et est complètement décrite page 71 et suivantes. Le programme informatique réalisé à partir de cette théorie est essentiellement utilisé pour simuler le comportement d'une éprouvette plane à structure cubique à faces centrées en glissement double symétrique. Comme le programme traite seulement des cas bi-dimensionnel, les auteurs ont été obligé de considérer deux systèmes dont les vecteurs de Burgers et les normales au plan sont contenus dans un même plan. Cette configuration n'existe pas en réalité pour la structure cubique à faces centrées. Les déformations sont supposées symétriques par rapport aux plans médians de l'éprouvette, ce qui permet de ne simuler qu'un quart de l'éprouvette. Les conditions aux limites sur un quadrant sont données sur la figure 1.23. Les auteurs analysent ainsi les hétérogénéités qui se produisent en glissement double.

Le modèle mécanique de Pierce et al a été utilisée à plusieurs reprises pour diverses applications présentées ici lorsqu'elles sont relatives à la simulation du comportement des agrégats cristallins.

Havlicek [HKTL90] a réalisé un code dédié à la simulation de polycristaux plats avec une seule couche de quelques grains. La frontière de ces grains est perpendiculaire à la surface de l'échantillon. La loi d'érouissage a la forme proposée par Taylor :

$$\tau^{(s)} = \tau_0 + A \sum_{i=1}^N |\gamma^{(i)}|,$$

et la loi d'écoulement est viscoplastique à seuil :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^{(s)} &= a \{ \exp[c(\tau^{(s)} - \tau_C^{(s)})/\tau_C^{(s)}] - 1 \} \text{ pour } \tau^{(s)} \geq \tau_C^{(s)} \\ \dot{\gamma}^{(s)} &= 0 \text{ pour } \tau^{(s)} < \tau_C^{(s)}, \end{aligned}$$

a et c sont des constantes du matériau. La simulation porte sur un joint triple dont les grains subissent une traction et fait apparaître une bonne correspondance entre les lignes de glissement expérimentales d'un échantillon de fer silicium et celles simulées. La faible déformation atteinte au cours de la simulation (0,1%) ne permet pas de vérifier la validité de la loi d'érouissage. Il eut été intéressant d'avoir une étude à plus grand taux de déformation et une comparaison autre que la seule correspondance entre les systèmes expérimentalement actifs et ceux simulés. L'érouissage ou l'évolution des orientations par exemple aurait pu constituer un ensemble important d'informations.

Ortiz et al. [MOS91,MOS90,MOS89], toujours avec le même schéma mécanique, en trois dimensions, simulent le comportement plastique autour de fissures stationnaires à l'intérieur de monocristaux à structures cubiques. Ils utilisent les mêmes lois d'érouissage et d'écoulement que celles proposées par Peirce et al (voir page 41 et 29). Leurs résultats sont notablement différents de la solution analytique de Rice mais sont en bon accord qualitatif avec des observations expérimentales notamment



pour la répartition des lignes de glissement autour de la tête de fissure. Ils soulignent la grande influence de la loi de comportement adoptée sur la solution obtenue.

Cailletaud et al [BC91,MC91a,MC91b] ont développé un programme informatique utilisant la méthode des éléments finis avec le même schéma mécanique. Ce programme permet la simulation de monocristal grâce à la loi de comportement de Cailletaud déjà présentée page 31. Des cas conventionnels sont simulés : la torsion d'un tube monocristallin et la traction d'un bicristal, mettant ainsi en évidence les potentialités d'un tel code pour la simulation de comportement de monocristaux.

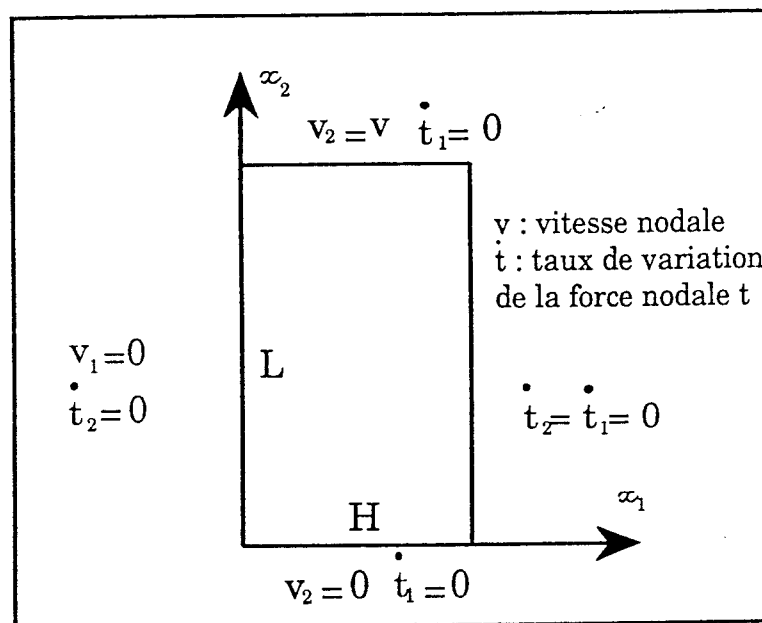


Figure 1.23: Conditions aux limites imposées sur un quadrant de l'éprouvette monocristalline



# Chapitre 2

## Modélisation

### 2.1 Rappel de mécanique des milieux continus

#### 2.1.1 Introduction

On donne dans cette partie quelques rappels de mécanique des milieux continus qui servent en même temps à préciser les notations et les conventions utilisées dans la suite de ce rapport. Pour plus d'informations, le lecteur se référera, par exemple, à Malvern [Mal69].

#### 2.1.2 Les équations cinématiques

On considère un ensemble de particules dans la configuration initiale  $\mathcal{C}_0$  à  $t=0$ . On suppose que cette ensemble de particules subit une déformation. Soit  $\mathcal{C}_t$  la configuration courante à l'instant  $t$  et soit  $\mathbf{x}_0$  et  $\mathbf{x}$ , les vecteurs positions d'un point matériel  $X$  dans les configurations  $\mathcal{C}_0$  et  $\mathcal{C}_t$  respectivement. Le mouvement du monocristal est donné par :

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$$

et le champ de vitesse :

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)}{\partial t}, \quad (2.1)$$

Pour les corps déformables, la grandeur intéressante au cours de la déformation est le gradient de la transformation  $\mathbf{F}$ . Ce gradient  $\mathbf{F}$ , associé au mouvement à un instant  $t$  fixé, est défini par :

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)}{\partial \mathbf{x}_0}. \quad (2.2)$$

On suppose que le champ  $\mathbf{F}$  est continûment différentiable et qu'il admet, pour n'importe quel temps fixé, l'inverse  $\mathbf{F}^{-1}$ .

Des équations (2.1) et (2.2), on déduit que :

$$\dot{\mathbf{F}} = \frac{\partial \dot{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{x}_0} = (\text{grad } \dot{\mathbf{x}})\mathbf{F}.$$

Un point superposé désigne la dérivée par rapport au temps pour  $\mathbf{x}_0$  constant et grad l'opérateur gradient par rapport à  $\mathbf{x}$  lorsque  $t$  est constant. La dernière équation peut être écrite sous la forme équivalente :

$$\text{grad} \mathbf{v} = \mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1},$$

où  $\mathbf{v}$  est le vecteur vitesse et  $\mathbf{L}$  le gradient de la vitesse. On définit les tenseurs vitesse de déformation et vitesse de rotation par :

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) \\ \mathbf{W} &= \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Le tenseur des dilatations entre les configurations  $\mathcal{C}_0$  et  $\mathcal{C}_t$  est  $\mathbf{C}$  :

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$$

Le tenseur des déformations de Green-Lagrange est :

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{I})$$

où  $\mathbf{I}$  est le tenseur unité.

### 2.1.3 Les différents tenseurs des contraintes utilisés

#### Tenseur de Cauchy

Soit  $d\mathbf{f}$  la force exercée sur l'élément d'aire  $ds$  orientée par la normale  $\mathbf{n}$  dans la configuration  $\mathcal{C}_t$ .

$$\mathbf{t} = \frac{d\mathbf{f}}{ds}$$

est le vecteur contrainte de Cauchy. Si  $\boldsymbol{\sigma}$  désigne le tenseur des contraintes de Cauchy, alors on peut obtenir  $\mathbf{t}$  de la manière suivante :

$$\mathbf{t} = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}.$$

#### Premier tenseur de Piola-Kirchhoff

Lorsqu'on rapporte la force  $d\mathbf{f}$  à la surface initiale  $ds_0$  dans la configuration  $\mathcal{C}_0$ , on obtient le vecteur contrainte nominale :

$$\mathbf{s} = \frac{d\mathbf{f}}{ds_0} = \mathbf{t} \frac{ds}{ds_0}.$$

$\mathbf{s}$  est lié à la normale  $\mathbf{n}_0$  de la surface  $ds_0$  par le premier tenseur de Piola-Kirchhoff  $\mathbf{S}$

$$\mathbf{s} = \mathbf{S} \mathbf{n}_0.$$

La relation entre le tenseur de Cauchy et le premier tenseur de Piola-Kirchhoff est donnée par :

$$\boldsymbol{\sigma} = j \mathbf{S} \mathbf{F}^T, \quad j = \det \mathbf{F}^{-1}.$$

### Second tenseur de Piola-Kirchhoff

Le premier tenseur de Piola-Kirchhoff n'est pas symétrique. On définit le second tenseur (symétrique) de Piola-Kirchhoff par :

$$\mathbf{II} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{S} = \mathbf{J} \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{F}^{-T}, \quad \mathbf{J} = \det \mathbf{F}.$$

### Tenseur de Kirchhoff

Le tenseur des contraintes de Kirchhoff est défini par  $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{J} \boldsymbol{\sigma}$ , et donc :

$$\mathbf{II} = \mathbf{F}^{-1} \boldsymbol{\tau} \mathbf{F}^{-T}$$

## 2.1.4 Les équations d'équilibre et les conditions aux limites

### Equations d'équilibre

En supposant qu'un solide déformable, soumis à des forces extérieures surfaciques occupe un domaine  $\Omega(t)$  de frontière  $\Sigma(t)$  à un instant donné  $t$  (voir figure 2.2), les équations locales d'équilibre sont :

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} &= \rho \mathbf{a} \\ \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}^T. \end{aligned}$$

où  $\rho$  est la masse volumique dans  $\Omega(t)$ ,  $\mathbf{f}$  le vecteur des forces volumiques par unité de masse et  $\mathbf{a}$  l'accélération, la divergence  $\operatorname{div}$  étant calculée par rapport aux positions des particules dans  $\mathcal{C}_t$ .

### Conditions aux limites

Les conditions aux limites peuvent être des conditions de vitesses imposées, ou de contraintes imposées :

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{v}^* \text{ sur } \Sigma_v(t), \\ \mathbf{t} &= \mathbf{t}^* \text{ sur } \Sigma_\sigma(t), \end{aligned}$$

où  $\mathbf{v}$  est le vecteur vitesse,  $\mathbf{t}$  le vecteur contrainte de Cauchy et  $\Sigma_v(t) \cup \Sigma_\sigma(t) = \Sigma(t)$ ,  $\Sigma_v(t)$  et  $\Sigma_\sigma(t)$  n'ayant pas de points intérieurs communs. Les quantités étoilées sont des fonctions connues du temps et de l'espace.

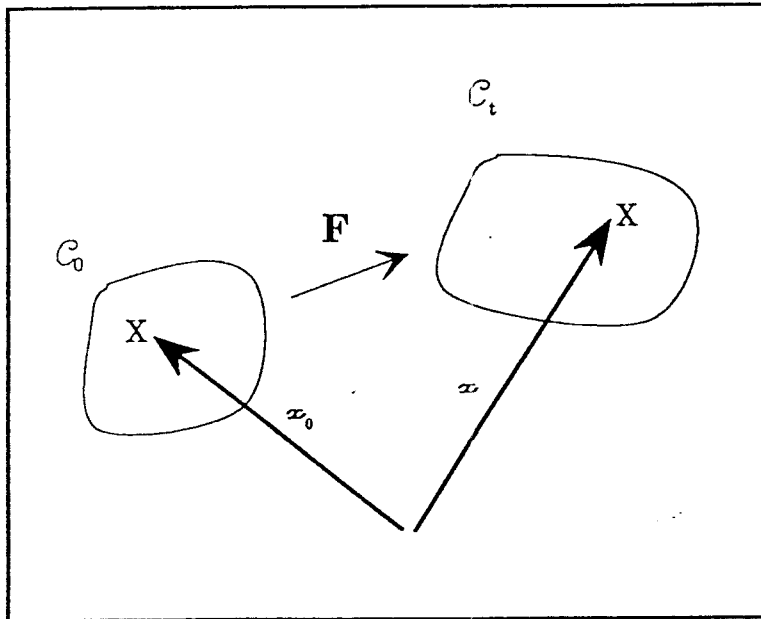


Figure 2.1: Définitions des grandeurs cinématiques

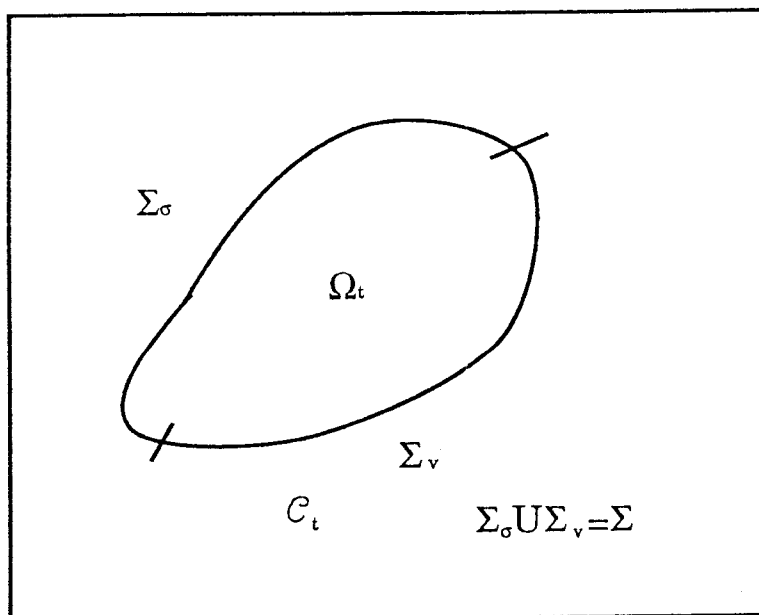


Figure 2.2: Définition des grandeurs associées aux équations d'équilibre

### Expression des équations d'équilibre en utilisant le premier tenseur de Piola-Kirchhoff

Ces équations sont réécrites en utilisant le premier tenseur de Piola-Kirchhoff :

$$\begin{aligned}\text{Div}\mathbf{S} + \rho_0\mathbf{b} &= \rho_0\mathbf{a} \\ \mathbf{S}\mathbf{F}^T &= \mathbf{F}\mathbf{S}^T\end{aligned}$$

où  $\rho_0$  est la masse volumique dans la configuration  $\mathcal{C}_0$  et Div est la divergence calculée par rapport aux positions des particules dans  $\mathcal{C}_0$ .

#### 2.1.5 Le principe des puissances virtuelles

Si les équations d'équilibre sont intégrées par la méthode des éléments finis, on utilise une formulation équivalente aux équations ci-dessus qu'on appelle principe des puissances virtuelles. L'identité

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \delta \mathbf{D} d\Omega = \int_{\Sigma_\sigma} \mathbf{t}^* \cdot \delta \mathbf{v} d\Sigma$$

doit être satisfaite pour tout champ de vitesses virtuelles  $\delta \mathbf{v}$ . Le champ de vitesses virtuelles est un champ vectoriel continûment dérivable, nul sur la partie  $\Sigma_v$  de la frontière où les conditions aux limites en vitesses sont imposées. Le tenseur gradient des vitesses virtuelles est défini par :

$$\begin{aligned}\delta \mathbf{D} &= \frac{1}{2}[\delta \mathbf{L} + (\delta \mathbf{L})^T] \\ \delta \mathbf{L} &= \frac{\partial(\delta \mathbf{v})}{\partial \mathbf{x}}\end{aligned}$$

#### 2.1.6 Commentaires

Dans la suite de ce chapitre, nous précisons la forme prise par les équations qui viennent d'être rappelées, pour le cas des grandes transformations élastoviscoplastiques du monocristal. Nous exposons quelles sont les lois de comportement plastique et élastique utilisées dans ce modèle mécanique.

## 2.2 Cinématique des grandes transformations élastoviscoplastiques

### 2.2.1 Cas général. Définitions



La mécanique du monocristal est bien définie. Son formalisme est présenté par exemple par Teodosiu [Teo70], Teodosiu et Sidoroff [TS76]

Considérons un monocristal  $\Omega$  à l'instant  $t_0$ , libre de toute traction de surface et de force volumique, à une température  $\theta_0$  uniforme et choisissons cette configuration, appelée  $\mathcal{C}_0$ , comme configuration de référence de  $\Omega$  (voir figure 2.3).

Supposons que ce monocristal est soumis à des contraintes résiduelles produites par des défauts cristallins. Alors une configuration globale, libre de toute contrainte, n'existe pas. Soit  $X$ , une particule arbitraire de  $\Omega$  et  $N(X)$  le voisinage matériel de  $X$  dont le diamètre dans  $\mathcal{C}_0$  est petit relativement à  $\Omega$ , mais relativement large par rapport à la distance entre les défauts cristallins. Pour déterminer la déformation élastique macroscopique résiduelle de  $N(X)$  dans  $\mathcal{C}_0$ , nous pouvons, du moins en principe, isoler ce voisinage et le relâcher. Soit  $\bar{\mathcal{C}}_0$ , la configuration de  $N(X)$  ainsi obtenue. Nous appelons alors la déformation de  $N(X)$  de  $\bar{\mathcal{C}}_0$  à  $\mathcal{C}_0$  la déformation résiduelle élastique de  $N(X)$  dans la configuration de référence  $\mathcal{C}_0$ .

Supposons maintenant que le cristal subit une déformation élastoviscoplastique sous l'action de chargements ou de champs de température non-homogènes. Soit  $\mathcal{C}_t$  la configuration courante à l'instant  $t$  et soient  $\mathbf{x}_0$  et  $\mathbf{x}$ , les vecteurs positions d'un point matériel  $X$  dans les configurations  $\mathcal{C}_0$  et  $\mathcal{C}_t$  respectivement<sup>1</sup>. Conformément à l'équation (2.2), le gradient de la transformation, associé au mouvement est :

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)}{\partial \mathbf{x}_0}.$$

Pour déterminer la déformation thermoélastique subie par  $N(X)$  au temps  $t$ , nous pouvons à nouveau isoler et relâcher le voisinage de  $N(X)$ . Soit  $\bar{\mathcal{C}}_t$ , la configuration du voisinage matériel obtenu à l'instant  $t$ , en réduisant instantanément sa température à  $\theta_0$ , le relâchant à nouveau des contraintes exercées sur lui par l'ensemble restant du cristal, tous les défauts cristallins étant à nouveau considérés comme fixés. Alors, la déformation de  $N(X)$  de  $\bar{\mathcal{C}}_t$  à  $\mathcal{C}_t$  est appelée la déformation thermoélastique de  $N(X)$  au temps  $t$ .

Comme  $\bar{\mathcal{C}}_0$ , la configuration locale  $\bar{\mathcal{C}}_t$  est un état naturel seulement pour les contraintes macroscopiques produites par les chargements extérieurs, le champ de température non-homogène et les incompatibilités de la déformation viscoplastique. Pour enlever les contraintes microscopiques produites par les dislocations, il serait nécessaire de couper le cristal en morceaux beaucoup plus petits avec des diamètres comparables à la distance entre les lignes de dislocations. En accord avec notre définition des configurations  $\bar{\mathcal{C}}_0$  et  $\bar{\mathcal{C}}_t$ , nous entendons par contraintes et déformations, uniquement les quantités macroscopiques, c'est-à-dire des valeurs moyennes calculées à partir d'éléments et surfaces macroscopiques, qui ne contiennent pas de fluctuations microscopiques.

Les configurations  $\bar{\mathcal{C}}_t$  et  $\bar{\mathcal{C}}_0$  ont été définies à une rotation de corps rigide près. Nous supprimons cette indétermination en supposant que l'orientation du réseau,

<sup>1</sup>Si on souhaite utiliser un schéma lagrangien réactualisé, l'intervalle de temps  $(t_0, t)$  est remplacé par l'écart de temps incrémental courant  $(t, t + \Delta t)$

définie loin des défauts cristallins, est conservée au cours du mouvement et quelle que soit la particule  $X \in \Omega$ . En accord avec cette convention, les directions et plans de glissement  $\bar{\mathbf{g}}^{(s)}$  et  $\bar{\mathbf{n}}^{(s)}$  de la configuration  $\bar{\mathcal{C}}_t$  resteront parallèles à ceux de la configuration  $\bar{\mathcal{C}}_0$  quels que soient  $X$  et  $t$ . Alors la déformation de  $N(X)$  de  $\bar{\mathcal{C}}_0$  à  $\bar{\mathcal{C}}_t$  est appelée déformation viscoplastique de  $N(X)$  au temps  $t$ . Soit  $Y$  une autre particule de  $N(X)$  et soient  $d\mathbf{x}$ ,  $d\mathbf{x}_o$ ,  $d\bar{\mathbf{x}}$  et  $d\bar{\mathbf{x}}_o$  les vecteurs positions de  $Y$  relativement à  $X$  dans les configurations  $\mathcal{C}_t, \mathcal{C}_o, \bar{\mathcal{C}}_0$ , et  $\bar{\mathcal{C}}_t$  respectivement. Nous définissons les tenseurs suivants :

- $\mathbf{A}$  distorsion thermoélastique,
- $\mathbf{A}_o$  distorsion thermoélastique résiduelle,
- $\mathbf{P}$  distorsion viscoplastique,

par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= \mathbf{A}d\bar{\mathbf{x}} \\ d\mathbf{x}_o &= \mathbf{A}_o d\bar{\mathbf{x}}_o \\ d\bar{\mathbf{x}} &= \mathbf{P}d\bar{\mathbf{x}}_o \end{aligned}$$

Nous supposons que pour des voisinages  $N(X)$  suffisamment petits les valeurs des distorsions définies en  $X$  ne dépendent pas du choix du voisinage  $N(X)$  et du point matériel  $Y \in N(X)$ . En conséquence, en répétant la même procédure pour toutes les particules  $X \in \Omega$  au temps  $t$ , nous pouvons définir les champs  $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ ,  $\mathbf{A}_o(\mathbf{x}_o)$  et  $\mathbf{P}(\mathbf{x}, t)$ . Dans le cas où la configuration  $\mathcal{C}_0$  est naturelle,  $\mathbf{A}_o$  se réduit à une rotation  $\mathbf{R}_o(\mathbf{x}_o)$

De plus on suppose que les champs  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{A}$ , et  $\mathbf{P}$  sont continûment différentiables et admettent, pour n'importe quel temps fixé, les inverses  $\mathbf{F}^{-1}$ ,  $\mathbf{A}^{-1}$  et  $\mathbf{P}^{-1}$ . En utilisant la relation :

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{x}_o,$$

on obtient une décomposition multiplicative du gradient de la transformation totale :

$$\mathbf{F} = \mathbf{A}\mathbf{P}\mathbf{A}_o^{-1} \quad (2.4)$$

Le gradient de la vitesse  $\mathbf{L}$  s'obtient en dérivant la relation précédente par rapport au temps :

$$\mathbf{L} = \text{grad}\mathbf{v} = \dot{\mathbf{A}}\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}\dot{\mathbf{P}}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^{-1}. \quad (2.5)$$

Cette relation montre que dans le cas non-linéaire, le gradient de la vitesse n'est pas décomposable en une partie purement plastique et une partie purement élastique, à moins que les déformations et les rotations élastiques soient suffisamment petites pour permettre le remplacement de  $\mathbf{A}$  par le tenseur unité dans le dernier terme. On

choisit d'appeler respectivement  $\mathbf{L}^E$  et  $\mathbf{L}^P$ , le premier terme et le deuxième terme du membre droit de l'équation (2.5) :

$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= \mathbf{L}^E + \mathbf{L}^P \\ \mathbf{L}^E &= \dot{\mathbf{A}}\mathbf{A}^{-1} \\ \mathbf{L}^P &= \mathbf{A}\dot{\mathbf{P}}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}^{-1}\end{aligned}$$

Soient  $n$  le nombre de systèmes potentiels du monocristal et notons  $\forall s = 1, n$  par  $\bar{\mathbf{g}}^{(s)}$  et  $\bar{\mathbf{n}}^{(s)}$  les vecteurs des systèmes de glissement dans la configuration  $\bar{\mathcal{C}}_t$ . La vitesse sur le système  $(s)$  dans cette configuration est notée  $\dot{\gamma}^{(s)}$ . Il peut être démontré que :

$$\bar{\mathbf{L}}^P = \dot{\mathbf{P}}\mathbf{P}^{-1} = \sum_s \dot{\gamma}^{(s)} \bar{\mathbf{g}}^{(s)} \bar{\mathbf{n}}^{(s)}.$$

### 2.2.2 Petites déformations élastiques

Pour les métaux, les déformations élastiques sont toujours très petites par rapport à l'unité, tandis que les rotations et les déformations plastiques peuvent être importantes. Ceci permet une linéarisation partielle du champ en supposant que les déformations élastiques sont petites devant l'unité.

Le point de départ est la décomposition polaire du tenseur  $\mathbf{A}$  (supposé non singulier) :

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{R},$$

où  $\mathbf{R}$  est un tenseur de rotation,  $\mathbf{V}$  un tenseur symétrique défini positif de déformation élastique pure. On suppose notamment que :

$$\mathbf{V} = \mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad , \quad \|\boldsymbol{\varepsilon}\| \ll 1, \quad (2.6)$$

et on néglige les termes  $O(|\boldsymbol{\varepsilon}|)$  devant l'unité. En introduisant ces deux relations dans l'équation (2.5), on montre que le gradient de vitesse a pour expression :

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^T + \overset{\circ}{\boldsymbol{\varepsilon}} + \sum_s \dot{\gamma}^{(s)} \mathbf{g}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)},$$

où  $\mathbf{g}^{(s)} = \mathbf{R}\bar{\mathbf{g}}^{(s)}$  et  $\mathbf{n}^{(s)} = \mathbf{R}\bar{\mathbf{n}}^{(s)}$  sont les vecteurs du système de glissement  $(s)$  relativement à la configuration  $\mathcal{C}_t$  et  $\overset{\circ}{\boldsymbol{\varepsilon}}$  est une dérivée objective de type Jaumann :

$$\overset{\circ}{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^T \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^T,$$

calculée avec la vitesse de rotation du réseau cristallin. Les tenseurs de vitesses de déformation et de rotation plastique ont pour expression :

$$\begin{aligned}\mathbf{D}^P &= \frac{1}{2} \sum_s \dot{\gamma}^{(s)} (\mathbf{g}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)} + \mathbf{n}^{(s)} \mathbf{g}^{(s)}), \\ \mathbf{W}^P &= \frac{1}{2} \sum_s \dot{\gamma}^{(s)} (\mathbf{g}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)} - \mathbf{n}^{(s)} \mathbf{g}^{(s)}),\end{aligned} \quad (2.7)$$

d'où l'expression du tenseur vitesse de déformation totale :

$$\mathbf{D} = \overset{\circ}{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{D}^P,$$

et la vitesse de rotation totale :

$$\mathbf{W} = \dot{\mathbf{R}}\mathbf{R}^T + \mathbf{W}^P.$$

## 2.3 Equations d'équilibre

On suppose que le monocristal, soumis à des forces extérieures surfaciques occupe un domaine  $\Omega(t)$  de frontière  $\Sigma(t)$  à un instant donné  $t$  et on néglige les forces massiques et les effets de l'inertie. Si on utilise le premier tenseur de Piola-Kirchhoff  $\mathbf{S}$ , les équations d'équilibre sont :

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{S} &= \mathbf{o}, \\ \mathbf{S}\mathbf{F}^T &= \mathbf{F}\mathbf{S}^T. \end{aligned}$$

Pour compléter les équations cinématiques et les équations d'équilibre, il faut donner les relations liant contraintes et grandeurs de déformation. La structure des lois de comportement est déduite à partir de considérations sur les quantités conjuguées relativement à la puissance développée par les contraintes :

$$\boldsymbol{\tau} : \mathbf{D} = \overline{\boldsymbol{\Pi}} : \dot{\mathbf{E}}^E + \overline{\boldsymbol{\Sigma}} : \overline{\mathbf{L}}^P$$

où  $\boldsymbol{\tau}$  est le tenseur des contraintes de Kirchhoff,  $\mathbf{E}^E$  le tenseur de Green-Lagrange défini à partir du tenseur  $\mathbf{A}$ ,  $\overline{\boldsymbol{\Pi}}$  le second tenseur de Piola-Kirchhoff (relatif à la configuration  $\overline{\mathcal{C}}_t$ ) :

$$\overline{\boldsymbol{\Pi}} = (\det \mathbf{A}) \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{A}^{-T},$$

et  $\overline{\boldsymbol{\Sigma}}$  un tenseur des contraintes conjugué au gradient de vitesse plastique sur  $\overline{\mathcal{C}}_t$  :

$$\overline{\boldsymbol{\Sigma}} = (\det \mathbf{A}) \mathbf{A}^T \boldsymbol{\sigma} \mathbf{A}^{-T}.$$

Les quantités ainsi conjuguées suggèrent que la loi d'écoulement et la loi élastique soient de la forme :

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{L}}^P &= \overline{\mathbf{L}}^P(\overline{\boldsymbol{\Sigma}}, Q) \\ \overline{\boldsymbol{\Pi}} &= \overline{\boldsymbol{\Pi}}(\mathbf{E}^E) \end{aligned}$$

$Q$  est un ensemble de paramètres internes définis sur la configuration  $\overline{\mathcal{C}}_t$  et pour lesquels des lois d'évolutions doivent être données.

## 2.4 Lois de comportement hyperélastique

### 2.4.1 Relations générales

Dans ce paragraphe, on souhaite obtenir la relation entre les vitesses de variation des déformations élastiques et des contraintes lors d'un processus élastoviscoplastique, en partant de la loi générale hyperélastique :

$$\mathbf{\Pi} = \frac{\partial W(\mathbf{E})}{\partial \mathbf{E}}, \quad (2.8)$$

où  $\mathbf{\Pi}$  est le second tenseur de contraintes de Piola-Kirchhoff,  $W$  est la densité de l'énergie de déformation élastique par unité de volume dans  $\mathcal{C}_0$  et  $\mathbf{E}$  le tenseur de Green-Lagrange. La forme de  $W$  dépend évidemment de la configuration de référence. Pour le cas élastoviscoplastique, on retrouve la même loi pour la transformation élastique qui lie la configuration locale relâchée  $\bar{\mathcal{C}}_t$  à la configuration courante  $\mathcal{C}_t$  :

$$\bar{\mathbf{\Pi}} = \frac{\partial W(\mathbf{E}^E)}{\partial \mathbf{E}^E}, \quad (2.9)$$

où  $\bar{\mathbf{\Pi}}$  représente le second tenseur de Piola-Kirchhoff associé à  $\bar{\mathcal{C}}_t$ . On a alors :

$$\bar{\mathbf{\Pi}} = J^e \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{A}^{-T}, \quad J^e = \det \mathbf{A} \quad (2.10)$$

et  $\mathbf{E}^E$  défini par :

$$\mathbf{E}^E = \frac{1}{2}(\mathbf{A}^T \mathbf{A} - \mathbf{I}).$$

La dérivée temporelle de (2.10) s'exprime en utilisant la dérivée de Truesdell  $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$  :

$$\dot{\bar{\mathbf{\Pi}}} = J^e \mathbf{A}^{-1} \dot{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{A}^{-T} \quad (2.11)$$

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{L}^E \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} (\mathbf{L}^E)^T + (\text{tr} \mathbf{L}^E) \boldsymbol{\sigma} \quad (2.12)$$

La dérivée temporelle de (2.9) est :

$$\dot{\bar{\mathbf{\Pi}}} = \frac{\partial^2 W(\mathbf{E}^E)}{\partial \mathbf{E}^E \partial \mathbf{E}^E} : (\mathbf{A}^T \mathbf{D}^E \mathbf{A})$$

La dérivée de Truesdell  $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$  est liée au tenseur de la vitesse de déformation élastique  $\mathbf{D}^E$  via le tenseur du quatrième ordre  $\mathbf{K}^E$  :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{K}^E : \mathbf{D}^E = \mathbf{K}^E : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^P) \quad (2.13)$$

où, par définition,  $\mathbf{K}^E$  est le tenseur symétrique du quatrième ordre donné par :

$$\mathbf{K}^E = (\det \mathbf{A}^{-1}) \mathbf{A} \left( \mathbf{A} \frac{\partial^2 W(\mathbf{E}^E)}{\partial \mathbf{E}^E \partial \mathbf{E}^E} \mathbf{A}^T \right) \mathbf{A}^T \quad (2.14)$$

### 2.4.2 Petites déformations élastiques

On souhaite obtenir les relations pour de petites déformations élastiques. On développe  $W$  en série de Taylor par rapport à  $\mathbf{E}^E$  et en tenant compte que  $\bar{\mathcal{C}}_t$  est une configuration locale relâchée donc libre de contraintes, on a :

$$W(\mathbf{E}^E) = \frac{1}{2} \bar{c}_{ijkl}^E E_{ij} E_{kl} + \frac{1}{6} \bar{C}_{ijklmn}^E E_{ij} E_{kl} E_{mn} + \dots$$

d'où,

$$\frac{\partial^2 W(\mathbf{E}^E)}{\partial E_{ij} \partial E_{kl}} = \bar{c}_{ijkl}^E + \bar{C}_{ijklmn}^E E_{mn} + \dots$$

$\bar{c}^E$  est le tenseur des constantes élastiques de deuxième ordre et  $\bar{C}^E$  est le tenseur des constantes élastiques de troisième ordre relativement à la configuration  $\bar{\mathcal{C}}_t$ . Les tenseurs  $\bar{c}^E$  et  $\bar{C}^E$  sont également symétriques. Nous faisons comme dans ce qui précède (page 52), l'hypothèse que les déformations élastiques sont petites par rapport à l'unité :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{I} + \boldsymbol{\varepsilon})\mathbf{R} \quad , \quad \|\boldsymbol{\varepsilon}\| \ll 1.$$

La relation (2.14) est alors approchée avec une erreur  $O(\|\boldsymbol{\varepsilon}\|)$  lorsque  $\varepsilon \rightarrow 0$  par :

$$\mathbf{K}^E := \mathbf{c}^E$$

avec :

$$c_{ijkl}^E = R_{ip} R_{jq} R_{km} R_{ln} \bar{c}_{pqmn}^E.$$

$i, j, k, l, m, n, p, q$  variant tous de 1 à 3 et la sommation étant effectuée sur les indices répétés deux fois.

### 2.4.3 Milieu isotrope

Dans le cas d'un matériau élastique isotrope, le tenseur des constantes élastiques est invariant à une rotation près et a la forme suivante :

$$c_{ijkm}^E = \lambda \delta_{ij} \delta_{km} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jm} + \delta_{im} \delta_{jk}) = \bar{c}_{ijkm}^E$$

où  $\delta_{ii}$  est le symbole de Kronecker,  $\lambda$  et  $\mu$  sont les coefficients de Lamé.

### 2.4.4 Notation de Voigt

Comme les tenseurs utilisés dans les lois de comportement exprimées dans la configuration de référence sont symétriques, il est avantageux d'utiliser une notation qui diminue le nombre d'opérations de calcul. La notation de *Voigt* associe chaque paire d'indice d'un tenseur avec un seul nombre :

$$11 \sim 1, \quad 22 \sim 2, \quad 33 \sim 3, \quad 23 \sim 4, \quad 13 \sim 5, \quad 12 \sim 6. \quad (2.15)$$

Ainsi la matrice des constantes élastiques sera donnée par :

$$c_{ijkl}^E = c_{IJ}^E.$$

Les composantes des tenseurs des contraintes et des déformations sont remplacées en utilisant la règle suivante :

$$\check{\sigma}_{ij} = \check{\sigma}_I, 2D_{kl}^E = (1 + \delta_{ij})D_I^E,$$

avec la notation donnée par la relation 2.15. La relation de la théorie linéarisée s'écrit alors :

$$\check{\sigma}_I = c_{IJ}^E D_J^E$$

I et J variant de 1 à 6. Un gain de temps appréciable est réalisé en utilisant cette relation lors du calcul des composantes du tenseur des contraintes.

### 2.4.5 Valeurs des constantes élastiques

Pour les différents matériaux cubiques à faces centrées, la matrice  $c_{IJ}^E$  a la forme donnée figure 2.4. Les constantes élastiques  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  et  $c_{44}$  sont données table 2.1 pour le cuivre et l'aluminium.

## 2.5 Lois d'écoulement et d'écrouissage

### 2.5.1 Loi d'écoulement

On considère qu'un système de glissement possède deux directions de glissement opposées (ce qui amène à considérer 12 systèmes dans le cas des cubiques à faces centrées par exemple). La relation d'écoulement adoptée pour déterminer les vitesses de glissement est une loi de type puissance actuellement très utilisée dans la littérature :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = a \left( \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right) \left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right|^{c-1}$$

$\tau^{(s)}$  est la cission résolue sur le système (s). a et c sont des constantes. Si  $\dot{\gamma}^{(s)} = a$  au cours de la déformation, alors  $\tau^{(s)} = \tau_C^{(s)}$  et  $(\tau_C^{(s)}, \gamma)$  peut être considérée comme une courbe de référence à la vitesse de cisaillement a. L'exposant c caractérise la sensibilité à la vitesse (c=0 rend le comportement insensible à la vitesse de déformation). La valeur élevée utilisée pour c (de l'ordre de 100) crée une très forte non-linéarité au voisinage de  $\tau_C^{(s)}$  qui peut être assimilée à la cission critique du matériau. Cette équation sera complétée dans la section suivante par une équation d'évolution de la cission critique  $\tau_C^{(s)}$ .

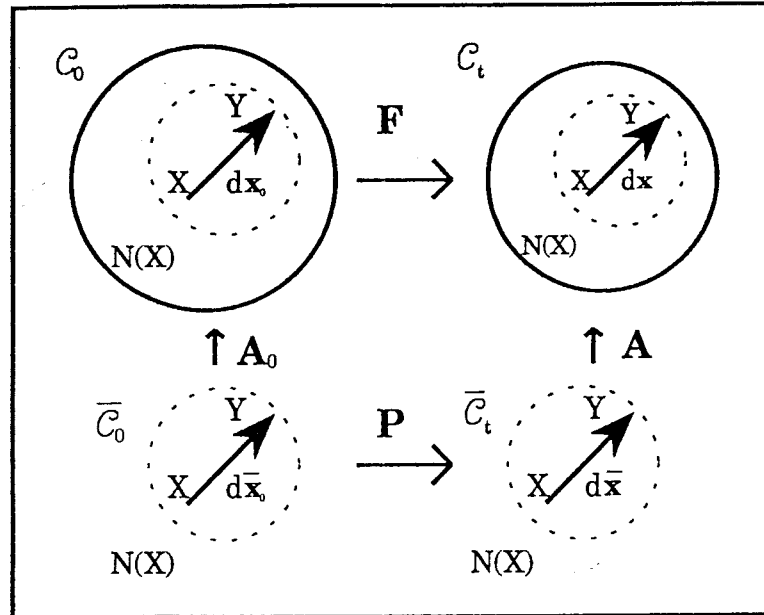


Figure 2.3: Définition des diverses grandeurs de déformation et des configurations associées avec la déformation élastoviscoplastique

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix}$$

Figure 2.4: Forme de la matrice des constantes élastiques dans les axes cristallo-graphiques de métaux à structures cubiques à faces centrées (notation de Voigt)



## 2.5.2 Loi d'écrouissage

### Introduction

Une des contraintes imposée est de décrire le plus simplement possible le phénomène complexe de l'écrouissage des monocristaux monophasés, d'une part pour limiter le nombre de paramètres à identifier, d'autre part, pour réduire le temps de calcul si cette loi est utilisée dans un code de calcul. En effet le calcul de l'écrouissage s'effectue dans les routines de plus bas niveaux, qui sont les plus fréquemment appelées et tout gain de temps à ce niveau se traduit globalement par des temps de simulation beaucoup plus courts.

Les phénomènes de durcissement latent, les différents stades de durcissement (stades I, II, III du monocristal) doivent être décrits. Le durcissement latent considéré est celui qui s'opère sur les systèmes latents en déformation monotone. On ne cherche pas simuler les essais de durcissement latent qui sont des essais discontinus et ne font pas intervenir les même phénomènes physiques.

La description de la loi utilise les densités de dislocations comme paramètres. Les densités de dislocations sont des variables d'état et n'exige pas la connaissance de l'histoire du matériau comme dans le cas d'une description fondée sur les quantités de glissement sur chaque système.

### Cission critique

L'expression de la cission critique dépend des densités de dislocations via la relation suivante :

$$\tau_C^{(s)} = \mu b \left( \sum_{p=1}^N a^{(sp)} \rho^{(p)} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.16)$$

- $\mu$  : module de cisaillement
- $b$  : module du vecteur de Burgers,
- $\rho^{(p)}$  : densité des dislocations sur le système ( $p$ ),
- $a^{(sp)}$  coefficient d'interaction entre les systèmes de glissement ( $s$ ) et ( $p$ )

Les effets d'interactions entre les dislocations de différents systèmes sont introduits dans l'écrouissage via la matrice d'interaction  $a^{(sp)}$ . La revue effectuée par Michel [MCS2] montre cette relation est en bon accord avec les résultats publiés par différents auteurs.

Il est important de signaler que cette relation est préférable à une loi du type :

$$\tau_C^{(s)} = \mu b \left( \sqrt{a_P \rho^{(s)}} + \sqrt{\sum_{p \neq s} a^{(sp)} \rho^{(p)}} \right), \quad (2.17)$$

dans laquelle :

- le premier terme représente la part d'écrouissage provoquée par les interactions entre les dislocations d'un même système ( $s$ ) qui contrôlent l'écrouissage en glissement simple,
- le second terme décrit l'effet sur l'écrouissage des interactions entre les dislocations forêts et le système ( $s$ ).

La relation (2.17) ne permet pas une estimation correcte du durcissement latent lorsqu'elle est couplée avec la loi de production des dislocations. En effet, le calcul montre que l'écrouissage devient plus important sur un système faiblement actif que sur un système totalement inactif.

### Loi d'évolution des densités de dislocations

Formellement, on peut décomposer le taux de production de dislocations au cours de la déformation en un terme de production et un autre d'annihilation :

$$\frac{d\rho^{(s)}}{d\theta^{(s)}} = \left(\frac{d\rho^{(s)}}{d\theta^{(s)}}\right)^+ - \left(\frac{d\rho^{(s)}}{d\theta^{(s)}}\right)^-,$$

la quantité de glissement accumulée  $\theta^{(s)}$  sur un système( $s$ ) est définie par :

$$\theta^{(s)} = \int_0^t |\dot{\gamma}^{(s)}| dt.$$

Une expression du taux de production des dislocations a été proposée par Kocks en 1976 [Koc76] :

$$\left(\frac{d\rho^{(s)}}{d\theta^{(s)}}\right)^+ = \frac{1}{bL^{(s)}}$$

$L^{(s)}$  est le libre parcours moyen. L'expression du libre parcours moyen pour le système ( $s$ ), dans le cas où le parcours des dislocations est limité par les dislocations forêts perçant le plan de glissement est donnée par :

$$L^{(s)} = \frac{K}{\sqrt{\sum_{p \neq s} \rho^{(p)}}}. \quad (2.18)$$

ou on fait l'hypothèse que la distance moyenne entre les obstacles produits par un système ( $p$ ) est approximativement proportionnelle à  $(\rho^{(p)})^{-\frac{1}{2}}$ .

L'annihilation, due au glissement dévié, qui se produit lorsque deux dislocations de signes opposés se rencontrent, est proportionnelle à la densité de dislocations. Essman et Mughrabi [EM79] proposent une expression qui décrit l'annihilation des dislocations séparées par une distance inférieure à une distance critique appelée  $y_C$  :

$$\left(\frac{d\rho^{(s)}}{d\theta^{(s)}}\right)^- = \frac{2y_C \rho^{(s)}}{b}.$$

Finalement la loi d'évolution des densités de dislocations est donnée par :

$$\dot{\rho}^{(s)} = \frac{1}{b} \left( \frac{1}{L^{(s)}} - 2y_C \rho^{(s)} \right) |\dot{\gamma}^{(s)}| \quad (2.19)$$

qui est une forme plus générale de l'équation (1.9). Nous supposons que cette relation est valable en stade I, II et III de déformation. La description du taux de production en stade I s'effectue en imposant une densité initiale de dislocations  $\rho(0)$  sur chaque système. Cette densité fixe la cission critique initiale de chaque système :

$$\tau_C^{(s)} = \mu b \left( \sum_{p=1}^N a^{(sp)} \rho(0) \right)^{\frac{1}{2}},$$

et le libre parcours moyen initial  $L(0)$  :

$$L(0) = \frac{K}{\sqrt{\sum_{p \neq s} \rho^{(p)}}}.$$

Lorsque le système (p) est le seul actif, on détermine la pente en stade I avec l'équation :

$$\frac{\dot{\tau}_C^{(p)}}{\dot{\gamma}^{(p)}} = \frac{a^{(pp)} \mu^2 b}{2\tau_C^{(p)}} \left( \frac{1}{L(0)} - 2y_C \rho^{(p)} \right).$$

La densité de dislocations de saturation en stade I sur le système actif (p) est obtenue lorsque la pente est nulle :

$$\rho_{sat}^I = \frac{1}{2y_C L(0)}.$$

On obtient donc avec ces équations un stade I, non linéaire. Les valeurs des coefficients de la loi déterminées par l'identification et la simulation montreront que ceci est acceptable car la pente obtenue en stade I varie faiblement et la courbe  $(\tau, \gamma)$  peut être approchée par une droite.

### Matrice d'écroissage

L'expression de la matrice d'écroissage  $h^{(su)}$  liant les variations de contraintes aux vitesses de glissement sur les systèmes se déduit des équations : (2.16), (2.19) et (2.18).

$$\begin{aligned} \dot{\tau}_C^{(s)} &= \sum_u h^{(su)} |\dot{\gamma}^{(u)}| \\ h^{(su)} &= \frac{\mu}{2} \left( \frac{1}{K} \sqrt{\sum_{p \neq u} \rho^{(p)}} - 2y_C \rho^{(u)} \right) \frac{a^{(su)}}{\sqrt{\sum_{p=1}^N a^{(sp)} \rho^{(p)}}} \end{aligned}$$

### 2.5.3 Commentaires

L'effet de la température apparaît d'une part, dans le changement de viscosité du matériau qui est obtenu en modifiant les paramètres  $a$  et  $c$  de la loi d'écoulement, d'autre part dans le taux d'annihilation qui est représenté par l'évolution adéquate du paramètre  $y_C$ . La simulation de l'effet Bauschinger est impossible car aucun effet de directionnalité n'a été introduit. En effet, l'évolution des densités de dislocations dépend de la valeur des vitesses de glissement mais pas de leur signe.

### 2.5.4 Identification des coefficients de la loi d'écrouissage

#### Introduction

Il s'agit maintenant d'identifier les coefficients des lois proposées dans le but d'effectuer des simulations. On montre tout d'abord par une analyse de stabilité de l'orientation en glissement double, au moyen des équations proposées, qu'un écrouissage anisotrope du matériau induit une hétérogénéité de déformation.

Ce qui amène à définir un concept d'anisotropie des matériaux qui n'est pas fondé sur les résultats des essais de durcissement latent qui sont des essais de chargement non-monotones. La distinction entre matériau isotrope et non-isotrope sera faite d'après le comportement observé en traction monotone. En traction uniaxiale monotone, un matériau qui présente une homogénéité de déformation en glissement double symétrique et une stabilisation sur la zone de symétrie après rotation en configuration de glissement simple initial sera qualifié d'isotrope (durcissement identique sur les systèmes). Réciproquement, un matériau qui traverse la zone de symétrie après un glissement simple initial et qui ne présente pas de déformations homogènes en glissement double initial (partition de l'éprouvette en plusieurs zones) présente un comportement anisotrope : le durcissement est plus important sur les systèmes inactifs que sur le système actif.

Pour un écrouissage anisotrope du matériau, il est également impossible d'exprimer des relations liant des grandeurs expérimentales aux coefficients de la loi alors que ces relations s'obtiennent aisément dans le cas isotrope. Nous nous proposons de retrouver grâce à la loi de comportement proposée, le comportement de matériaux isotropes (durcissement identique sur chaque système) dans le cas d'un essai de chargement monotone et nous montrons comment identifier analytiquement la loi pour ce type de matériau. Les situations que nous voulons simuler constituent notre cahier des charges

#### Cahier des charges

L'essai le plus pratiqué est l'essai de traction uniaxiale pour lequel il existe des grandeurs caractéristiques pour des configurations d'essais particulières.

- *La phase de glissement facile.* Un seul système est majoritairement actif lorsque l'axe de traction se situe à l'intérieur du triangle standard. Les dislocations

glissent sans rencontrer d'obstacles. L'écroutissage est faible.

- *La phase de glissement double.* La rotation du réseau a approché l'axe de traction d'une zone de glissement double et un second système s'active. Les dislocations de ce second système produisent des obstacles pour le premier, ce qui durcit le matériau. Après une certaine quantité de glissement double, la densité de dislocations est très élevée. On observe alors des phénomènes d'annihilation et de glissement dévié qui conduisent à un écroutissage moindre du matériau (stade III).
- *Glissement double symétrique initial.* Si l'axe de traction est situé sur l'axe de symétrie, le glissement double est amorcé dès le début. On rappelle que si le durcissement est isotrope, la déformation reste homogène dans l'éprouvette, sinon, on observe une partition de l'éprouvette en zones privilégiant soit l'un ou l'autre des deux systèmes actifs.

Dans le paragraphe suivant, on effectue une analyse de stabilité de la rotation en glissement double en utilisant les équations de la loi d'écroutissage.

### Analyse de stabilité en situation de glissement double symétrique

On considère deux types d'interactions entre les dislocations : interaction entre dislocations d'un même système et interaction entre dislocations de système différents. L'écroutissage latent est plus important que l'auto-écroutissage :

- auto-durcissement, coefficient  $a_P$ ,
- durcissement provoqué par les dislocations autres que celles du système ( $s$ ) : coefficient  $a_F > a_P$ .

Nous considérons seulement deux coefficients car l'analyse ne fait intervenir que deux systèmes de glissement. Ce sont le système primaire et le système conjugué en essai de traction qui présentent systématiquement une interaction de type fort. La cission critique est calculée par :

$$\tau_C^{(s)} = \mu b \sqrt{a_P \rho^{(s)} + a_F \sum_{u \neq s} \rho^{(u)}}$$

Dans le cas d'un glissement double symétrique, les cissions critiques sur chacun des systèmes actifs sont calculables en utilisant la relation (2.5.4) :

$$\begin{aligned} \tau_C^{(1)} &= \mu b \sqrt{a_P \rho^{(1)} + a_F \rho^{(2)}} \\ \tau_C^{(2)} &= \mu b \sqrt{a_P \rho^{(2)} + a_F \rho^{(1)}} \end{aligned}$$

Supposons qu'une petite variation de densité de dislocations se produise sur les systèmes, on a les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\dot{\rho}^{(1)} &= \frac{1}{b} \left( \frac{\sqrt{\rho^{(2)}}}{K} \right) \dot{\gamma}^{(1)}, \\ \dot{\rho}^{(2)} &= \frac{1}{b} \left( \frac{\sqrt{\rho^{(1)}}}{K} \right) \dot{\gamma}^{(2)},\end{aligned}$$

dans lesquelles on néglige l'effet de l'annihilation car on suppose que le matériau n'est pas encore très déformé. Si  $\rho^{(1)}$  devient supérieure à  $\rho^{(2)}$  :

$$\rho^{(1)} = \rho^{(2)} + \Delta\rho,$$

alors  $\tau_C^{(1)}$  devient inférieur à  $\tau_C^{(2)}$  et le glissement devient plus important sur le premier système. Cette variation de cission critique n'est pas immédiatement compensée par une augmentation de la cission appliquée sur le système le plus actif, en effet la rotation générée par glissement est faible au voisinage de la zone de stabilité et la cission appliquée  $\tau^{(1)}$  reste pratiquement égale à  $\tau^{(2)}$  au début du phénomène. Cette situation est donc instable.

Cherchons les conditions sur  $R = a_F/a_P > 1$  pour que le phénomène d'avalanche ne se produise pas. Le rapport des quantités de glissements est donné par :

$$\frac{\dot{\gamma}^{(1)}}{\dot{\gamma}^{(2)}} = \left( \frac{\tau_C^{(2)}}{\tau_C^{(1)}} \right)^c \quad (\text{loi d'écoulement}).$$

Donc :

$$\frac{\dot{\rho}^{(1)}}{\dot{\rho}^{(2)}} = \sqrt{\frac{\rho^{(2)}}{\rho^{(1)}} \left( \frac{\tau_C^{(2)}}{\tau_C^{(1)}} \right)^c} = \sqrt{\frac{\rho^{(2)}(a_P\rho^{(2)} + a_F\rho^{(1)})^c}{\rho^{(1)}(a_P\rho^{(1)} + a_F\rho^{(2)})^c}} \quad (2.20)$$

En introduisant  $R$  dans l'expression (2.20), l'accroissement relatif des dislocations est :

$$\frac{\dot{\rho}^{(1)}}{\dot{\rho}^{(2)}} = \sqrt{\frac{\rho^{(2)}}{\rho^{(2)} + \Delta\rho} \left[ \frac{(R+1)\rho^{(2)} + R\Delta\rho}{(R+1)\rho^{(2)} + \Delta\rho} \right]^c}.$$

L'expression ci-dessus est approchée par :

$$\frac{\dot{\rho}^{(1)}}{\dot{\rho}^{(2)}} = 1 + \frac{\Delta\rho}{\rho^{(2)}} \left( \frac{R-1}{R+1} c - 1 \right)$$

lorsque  $\Delta\rho$  est petit. Pour avoir stabilité sur la zone de symétrie, il faut que :  $\frac{d\rho^{(1)}}{d\rho^{(2)}} < 1$  soit :

$$\left( \frac{R-1}{R+1} \right) c - 1 < 0$$

ce qui implique :

$$1 < R < \frac{c+1}{c-1} \simeq \frac{101}{99}$$

donc  $a_P \simeq a_F$  et la relation (2.20) s'écrit :

$$\frac{\dot{\rho}^{(1)}}{\dot{\rho}^{(2)}} = \left( \frac{\rho^{(2)}}{\rho^{(1)}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Les densités de dislocations ont tendance à s'équilibrer et rester égales.

Si on suppose que  $a_P < a_F$  dans le cas d'un matériau à consolidation plus importante sur les systèmes latents que sur le système actif, on obtient l'approximation suivante de l'équation (2.20) :

$$\frac{\dot{\rho}^{(1)}}{\dot{\rho}^{(2)}} \approx \left( \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(2)}} \right)^{\frac{c-1}{2}}$$

Comme  $c$  est 100 ( $c \simeq 100$ ), si  $\rho^{(1)}$  est supérieure à  $\rho^{(2)}$ , très rapidement le taux de production de  $\rho^{(1)}$  devient très supérieur à celui de  $\rho^{(2)}$ , l'instabilité est très forte.

*Cette analyse montre que pour avoir stabilité en glissement double symétrique, le rapport entre durcissement latent et auto-écrouissage doit être proche de 1.*

Rappelons que cette stabilité est observée pour les métaux purs à structure cubique à faces centrées. Ces matériaux pourront être simulés en utilisant une forme isotrope de la loi de comportement que nous proposons.

Ce résultat remet en cause résultats observés en durcissement latent, car pour ces mêmes matériaux, les essais de durcissement latent révèlent une anisotropie importante. Nous avons déjà souligné que les essais de durcissement sont des essais de chargement non-continus qui font certainement intervenir d'autres mécanismes que ceux qui se déroulent en déformation monotone. Dans le cas d'une déformation monotone des structures se mettent en place progressivement dans le matériaux alors que dans les essais de durcissement latent, on injecte artificiellement, sur une structure de dislocations pré-existante, une quantité importante de dislocation d'un autre système. Il se produit certainement des phénomènes transitoires, que la loi de comportement telle qu'elle est proposée ne peut pas simuler.

Dans le cas des métaux impurs, l'anisotropie existe et il faut inclure cette caractéristique dans la loi en différenciant les facteurs de durcissement latent et d'auto-écrouissage.

### **Identification des coefficients dans le cas d'un durcissement isotrope sur tous les systèmes**

Cet exemple est traité pour le cas du cuivre pour lequel on dispose de nombreuses données dans la littérature et qui présente un comportement stable en glissement

double symétrique lorsqu'il est très pur [Jao65,GS55]. On suppose que tous les termes  $a^{(sp)}$  de la matrice d'écrouissage sont égaux. on pose :

$$\sqrt{a^{(sp)}} = \alpha \quad , \quad \forall (s, p)$$

Les équations pour lesquelles on souhaite obtenir une valeur des coefficients sont :

$$\tau_C^{(s)} = \alpha \mu b \sqrt{\sum_{u=1}^N \rho^{(u)}}$$

$$\dot{\rho}^{(s)} = \frac{1}{b} \left( \frac{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^{(u)}}}{K} - 2 y_C \rho^{(s)} \right) \dot{\gamma}^{(s)}$$

Les paramètres sont identifiés en utilisant un essai de traction en situation symétrique pour lequel, il existe un glissement double initial (voir figure 2.5 et table 2.2). Ces résultats représentent une moyenne pour l'ensemble des auteurs.

En situation de glissement double symétrique, les cissions critiques et les densités de dislocations sur les systèmes 1 et 2 sont égales. On écrit la cission critique  $\tau_C$  et la densité de dislocation  $\rho$  sans indice qui correspondent à l'un ou l'autre des deux systèmes actifs :

$$\tau_C = \alpha \mu b \sqrt{2\rho}.$$

Le taux de production de dislocations sur l'un des 2 systèmes actifs, en négligeant l'annihilation, est donné par :

$$\dot{\rho} = \frac{1}{b} \frac{\sqrt{\rho}}{K} \dot{\gamma}$$

La pente initiale en glissement double a pour expression :

$$\frac{d\tau_C}{d\gamma} = \frac{\alpha \mu}{\sqrt{2}K} = \Theta_{II} \quad (2.21)$$

Dans la littérature, la pente de la courbe  $(\tau, \gamma)$  en glissement double a une pente  $\Theta_{II}$  qui vaut en moyenne  $\mu/150$ .

La même analyse, que précédemment est effectuée en utilisant le libre parcours moyen  $L$  sur un des deux systèmes actifs dans l'expression du taux de production des densités de dislocations. Le libre parcours moyen a pour expression :

$$L = \frac{K}{\sqrt{\rho}},$$

donc :

$$\dot{\rho} = \frac{1}{bL} \dot{\gamma},$$

toujours en négligeant l'annihilation. En combinant cette dernière relation avec (2.5.4), il vient :

$$\Theta_{II} = \frac{(\alpha \mu)^2 b}{\tau_C L}$$



Matériau	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{44}$
Al	122,2	90,7	45,4
Cu	166,1	119,9	75,6

Tableau 2.1: Valeurs des constantes élastiques du cuivre et de l'aluminium en GPa.

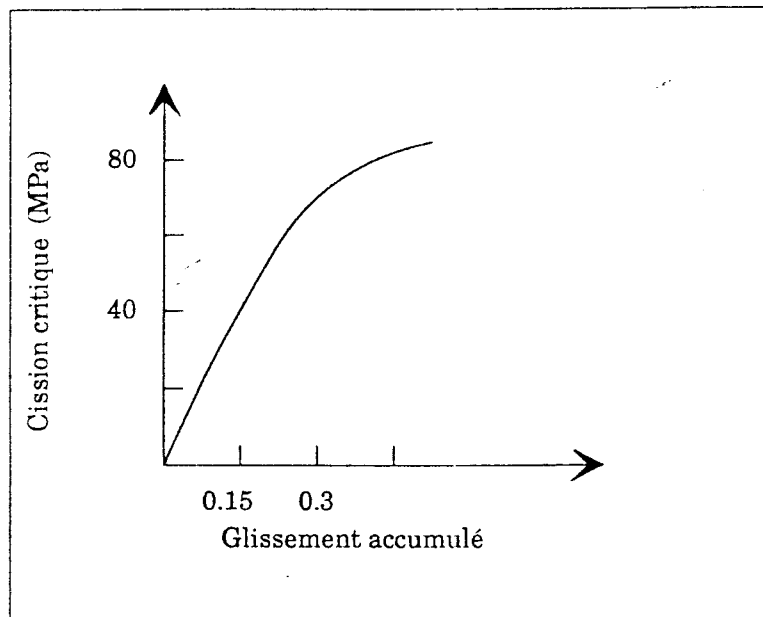


Figure 2.5: Courbe cission critique  $\tau$  en fonction du glissement cristallographique  $\gamma$  obtenue dans le cas du cuivre pur en situation de glissement double

$\tau_0$	1 MPa
$\tau_{III}$	25 MPa
$\tau_{sat}$	80 MPa
$a_{III}$	0.3-0.4
$\Theta_{II}$	$\frac{\mu}{150} = 300$ MPa

Tableau 2.2: Grandeurs caractéristiques obtenues pour l'essai de traction

Pour le cuivre, en stade II, Seeger, en mesurant l'évolution de la longueur des lignes de glissement, a identifié une relation linéaire entre le libre parcours moyen et l'incrément de cisaillement :

$$L = \frac{a}{\Delta\gamma} \quad . \quad a = 10^{-3},$$

que l'on introduit dans l'expression précédemment calculée pour déduire la valeur de  $\alpha$  :

$$\alpha = \frac{\Theta_{II}}{\mu} \sqrt{\frac{a}{b}}$$

En introduisant cette valeur dans la relation (2.21), on obtient K.

L'identification de  $y_C$  est faite en stade III. A ce stade, la situation est toujours symétrique sur les deux systèmes et le taux de production est nul à cause de l'effet de l'annihilation des dislocations.

$$\tau_{\text{sat}} = \alpha\mu b\sqrt{2\rho},$$

$$0 = \frac{\sqrt{\rho}}{K} - 2y_C\rho$$

de ces deux équations on extrait  $y_C$  :

$$y_C = \frac{\alpha\mu b}{\sqrt{2}\tau_{\text{sat}}K}$$

La densité initiale de dislocations est trouvée en écrivant la cission critique à l'instant  $t=0$  :

$$\tau_C^{(s)}(0) = \alpha\mu b\sqrt{12\rho(0)}$$

Les valeurs sont identifiées à partir des valeurs de la table (2.2) et sont rassemblées dans la table (2.3). Nous supposons que ces valeurs identifiées à partir d'un essai en glissement double, en stade II et III, restent valables pour la description du stade I.

$\tau_0$	1MPa
$\mu$	45000 MPa
b	$2,57 \times 10^{-10} \text{m}$
K	76
$\alpha$	0,72
$y_C$	2,6b
$\rho(0)$	$1,2 \times 10^9 \text{m}^{-2}$
L(0)	$0,66 \times 10^{-3} \text{m}$

Tableau 2.3: Valeurs numériques des coefficients de la loi d'érouissage dans le cas où le matériau est du cuivre pur à comportement isotrope.

# Chapitre 3

## Méthode des éléments finis dans le cas du monocristal

### 3.1 Principe des puissances virtuelles

#### 3.1.1 Formulation lagrangienne réactualisée

La méthode des éléments finis utilise une formulation intégrale équivalente aux équations d'équilibre et aux conditions aux limites correspondantes. Sous la forme lagrangienne réactualisée<sup>1</sup> en négligeant les forces volumiques, le principe des puissances virtuelles s'écrit :

$$\int_{\Omega(t)} (\boldsymbol{\sigma} + \Delta \mathbf{S}) : \delta \mathbf{L} d\Omega = \int_{\Sigma(t)} (\mathbf{t}^* + \Delta \mathbf{s}^*) \delta \mathbf{v} d\Sigma$$

quelques soient les vitesses virtuelles<sup>2</sup>  $\delta \mathbf{v}$ .  $\delta \mathbf{L}$  est obtenu par dérivation temporelle des vitesses virtuelles. L'intégration est effectuée à l'instant  $t$  sur le domaine  $\Omega(t)$  et sur la frontière  $\Sigma(t)$  de ce même domaine.

- $\Delta \mathbf{S}$  est l'incrément du premier tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff,
- $\Delta \mathbf{s}^* = \mathbf{s}^* \Delta t$  est l'incrément du vecteur contrainte nominale,
- $\boldsymbol{\sigma}$  est le tenseur des contraintes de Cauchy,
- $\mathbf{t}^*$  est le vecteur contrainte de Cauchy.

Afin d'obtenir une forme totalement exploitable du principe des puissances virtuelles, il convient d'exprimer l'incrément  $\Delta \mathbf{S}$  du premier tenseur des contraintes de

---

<sup>1</sup>La formulation lagrangienne réactualisée est une expression du principe des puissances virtuelles obtenue en prenant comme configuration de référence celle correspondant à l'instant  $t$  et en considérant la transformation sur l'intervalle de temps  $(t, t + \Delta t)$

<sup>2</sup> $\delta \mathbf{v}$  est un champ de vitesse tel que  $\delta v_i = 0$  sur  $\Sigma_v$  la frontière du domaine où les vitesses sont imposées

Piola-Kirchhoff en fonction de l'incrément du déplacement :

$$\Delta \mathbf{u} = \mathbf{v} \Delta t$$

La dérivée du premier tenseur de Piola-Kirchhoff est lié au tenseur de Cauchy par la relation suivante :

$$\dot{\mathbf{S}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\sigma} \mathbf{L}^T + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr} \mathbf{L} \quad (3.1)$$

En introduisant l'expression de  $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$  déduite de la relation (2.12), page 54 dans la relation (3.1), on obtient :

$$\dot{\mathbf{S}} = \check{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{L}^P \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} (\mathbf{L}^P)^T.$$

La dérivée de Truesdell est fonction du tenseur vitesse de déformation élastique  $\mathbf{D}^E$  via la loi de comportement hyperélastique selon l'équation (2.13). L'expression de  $\dot{\mathbf{S}}$  est réécrite :

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbf{K} : \mathbf{D}^E + \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{L}^P \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} (\mathbf{L}^P)^T$$

En introduisant les quantités  $\mathbf{W}^P$  et  $\mathbf{D}^P$  dans la relation précédente, on obtient :

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbf{K}^E : \mathbf{D} + \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} - (\mathbf{K}^E \mathbf{D}^P - \mathbf{D}^P \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^P - \mathbf{W}^P \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{W}^P). \quad (3.2)$$

Si on note  $\mathbf{D}^{(s)}$ , la partie symétrique du tenseur  $\mathbf{g}^{(s)} \mathbf{n}^{(s)}$  et  $\mathbf{W}^{(s)}$  sa partie antisymétrique, en utilisant les relations (2.7) et (3.2) on trouve :

$$\mathbf{S} = \mathbf{K}^E : \mathbf{D} + \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} - \sum_s (\mathbf{K}^E \mathbf{D}^{(s)} - \mathbf{D}^{(s)} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^{(s)} - \mathbf{W}^{(s)} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{W}^{(s)}) \dot{\gamma}^{(s)}.$$

Dans le cas des petites déformations élastiques, cette relation prend la forme :

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathcal{D} : \mathbf{L} - \sum_s \dot{\gamma}^{(s)} \mathcal{R}^{(s)} \quad (3.3)$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^{(s)} &= \mathbf{c}^E : \mathbf{D}^{(s)} - \mathbf{D}^{(s)} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{D}^{(s)} - \mathbf{W}^{(s)} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{W}^{(s)}, \\ \mathcal{D}_{ijkl} &= c_{ijkl}^E + \delta_{ik} \sigma_{lj} \end{aligned}$$

$\mathbf{c}^E$  est le tenseur des constantes élastiques relatives à la configuration  $\mathcal{C}_t$ . La forme incrémentale de la relation 3.3 est donnée par :

$$\Delta \mathbf{S} = \mathcal{D} : (\mathbf{L} \Delta t) - \sum_s \Delta \gamma^{(s)} \mathcal{R}^{(s)} \quad (3.4)$$

L'expression de  $\Delta \gamma^{(s)}$  sera calculée en fonction de la dérivée au temps  $t + \beta t$ ,  $\beta$  est un paramètre compris entre 0 et 1. Pour la valeur 0 les calculs sont faits de façon totalement explicite, ce qui, compte tenu de la très forte non-linéarité de la loi d'écoulement, pose de nombreux problèmes de convergence et impose le choix d'un pas de calcul très petit. Le calcul des incréments de glissement sur les systèmes est fait pour  $\beta \neq 0$ , selon le schéma de "forward gradient", méthode proposée par Peirce et al [PSN84].

### 3.1.2 Estimation des incréments de glissement par la méthode du “Forward Gradient”

La méthode adoptée pour estimer les incréments de déformation est du type “forward gradient”. Son rôle est d’accroître l’incrément de pas de calcul grâce à la prédiction des vitesses de glissement et une modification conséquente de la matrice de rigidité. Son principe a été exposé par [PSN84] pour décrire la plasticité phénoménologique des métaux et utilisée fréquemment pour décrire la plasticité du monocristal [PAN82, PAN83, NALP85, MOS89, MC91b].

L’incrément de glissement sur le système (s) au temps t est exprimé par :

$$\Delta\gamma^{(s)} = \gamma_{t+\Delta t}^{(s)} - \gamma_t^{(s)}.$$

On utilise une interpolation linéaire comme approximation de l’expression précédente :

$$\Delta\gamma^{(s)} = \left[ (1 - \beta)\dot{\gamma}_t^{(s)} + \beta\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(s)} \right] \Delta t$$

Le paramètre  $\beta$  peut prendre des valeurs entre 0 et 1. On emploie un développement en série au premier ordre pour estimer la vitesse de glissement en fin d’incrément :

$$\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(s)} \simeq \dot{\gamma}_t^{(s)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \tau^{(s)}} \right|_t \Delta\tau^{(s)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \tau_C^{(s)}} \right|_t \Delta\tau_C^{(s)} + \dots$$

En reportant cette expression dans l’interpolation linéaire, on obtient :

$$\Delta\gamma^{(s)} = \left\{ \dot{\gamma}_t^{(s)} + \beta \left( \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \tau^{(s)}} \right|_t \Delta\tau^{(s)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \tau_C^{(s)}} \right|_t \Delta\tau_C^{(s)} \right) \right\} \Delta t.$$

Compte tenu de la loi d’écoulement utilisée, les dérivées partielles de la relation précédente ont la forme suivante :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^{(s)} &= a \left( \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right) \left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right|^{c-1} \\ \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \tau^{(s)}} &= \frac{ac}{\tau^{(s)}} \left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right|^{c-1} = \frac{c}{\tau^{(s)}} \dot{\gamma}^{(s)} \\ \frac{\partial \dot{\gamma}^{(s)}}{\partial \tau_C^{(s)}} &= -\frac{ac}{(\tau_C^{(s)})^2} \left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right|^{c-1} = -\frac{c}{\tau_C^{(s)}} \dot{\gamma}^{(s)} \end{aligned}$$

L’incrément de glissement sur le système (s) est alors donné par l’expression suivante :

$$\Delta\gamma^{(s)} = \dot{\gamma}_t^{(s)} \left\{ 1 + \beta c \left( \frac{\Delta\tau^{(s)}}{\tau^{(s)}} - \frac{\Delta\tau_C^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right) \right\} \Delta t. \quad (3.5)$$

On peut démontrer que la dérivée par rapport au temps de la cission résolue sur le système (s) est donnée par :

$$\dot{\tau}^{(s)} = \mathcal{R}^{(s)} : \mathbf{D}^E = \mathcal{R}^{(s)} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^P) = \mathcal{R}^{(s)} : (\mathbf{D} - \sum_u \dot{\gamma}^{(u)} \mathbf{D}^{(u)}),$$

d'où l'expression de l'incrément de cission résolue à l'instant t en fonction des quantités de glissement sur chaque système :

$$\Delta\tau^{(s)} = \mathcal{R}^{(s)} : (\mathbf{D}\Delta t - \sum_u \Delta\gamma^{(u)} \mathbf{D}^{(u)}).$$

La forme dérivée de la loi d'érouissage est (voir page 60) :

$$\dot{\tau}_C^{(s)} = \sum_u h^{(su)} |\dot{\gamma}^{(u)}|$$

L'incrément de cission critique est exprimé en fonction des quantités de glissement :

$$\Delta\tau_C^{(s)} = \sum_u h^{(su)} \Delta\gamma^{(u)} \text{sgn}(\tau^{(u)})$$

En reportant l'expression des incréments des cissions dans la relation (3.5), on obtient un système linéaire d'inconnues  $\Delta\gamma^{(s)}$  :

$$\Delta\gamma^{(s)} = \dot{\gamma}_t^{(s)} \left\{ 1 + \beta c \left[ \frac{1}{\tau^{(s)}} \mathcal{R}^{(s)} : (\mathbf{D}\Delta t - \sum_u \Delta\gamma^{(u)} \mathbf{D}^{(u)}) - \frac{1}{\tau_C^{(s)}} \sum_u h^{(su)} \Delta\gamma^{(u)} \text{sgn}(\tau^{(u)}) \right] \right\} \Delta t,$$

que l'on transforme :

$$\sum_u \mathcal{N}^{(su)} \Delta\gamma^{(u)} = (\dot{\gamma}_t^{(s)} + \mathbf{Q}^{(s)} : \mathbf{L}) \Delta t,$$

avec les notations suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{(s)} &= \frac{\beta c \dot{\gamma}_t^{(s)}}{\tau^{(s)}} \mathcal{R}^{(s)} \Delta t \\ \mathcal{N}^{(su)} &= \delta^{(su)} + \beta t \dot{\gamma}_t^{(s)} \left( \frac{1}{\tau^{(s)}} \mathcal{R}^{(s)} : \mathbf{D}^{(u)} + \frac{1}{\tau_C^{(s)}} h^{(su)} \text{sgn}(\tau^{(u)}) \right) \Delta t. \end{aligned}$$

Dans la suite, on utilise l'expression suivante pour le calcul des incréments de glissement :

$$\Delta\gamma^{(s)} = (f^{(s)} + \mathbf{F}^{(s)} : \mathbf{L}) \Delta t$$

où les notations adoptées sont les suivantes :

$$\begin{aligned} f^{(s)} &= \sum_u \mathcal{N}^{-1(su)} \dot{\gamma}_t^{(u)}, \\ \mathbf{F}^{(s)} &= \sum_u \mathcal{N}^{-1(su)} \mathbf{Q}^{(u)} \end{aligned}$$

On note que si  $h^{(su)}$  est non-symétrique, alors  $\mathcal{N}^{(su)}$  est elle-même non-symétrique. Cette méthode conduit à chaque pas et pour chaque point d'intégration à résoudre un système 12x12 pour les cubiques à faces centrées et 24x24 pour les cubiques centrés. Du temps de calcul et de la place en mémoire pour le calculateur sont économisés en résolvant le système linéaire établi pour les systèmes dont la vitesse de glissement est numériquement significative. Nous avons considéré les systèmes dont les vitesses de glissement calculées sont supérieures à  $10^{-50}\text{s}^{-1}$ .

### 3.1.3 Ecriture finale du principe des puissances virtuelles

En utilisant la relation (3.1.2) pour l'incrément de la quantité de glissement  $\Delta\gamma$  sur chaque système, l'équation (3.4) est réécrite :

$$\Delta\mathbf{S} = \mathcal{D} : (\mathbf{L}\Delta t) - \sum_s (f^{(s)} + \mathbf{F}^{(s)} : \mathbf{L}) \mathcal{R}^{(s)} \Delta t$$

soit

$$\Delta\mathbf{S} = (\mathcal{D}^* : \mathbf{L} - \mathcal{P}) \Delta t,$$

si :

$$\begin{cases} \mathcal{D}^* &= \mathcal{D} - \sum_s \mathcal{R}^{(s)} \otimes \mathbf{F}^{(s)} \\ \mathcal{P} &= \sum_s f^{(s)} \mathcal{R}^{(s)} \end{cases}$$

Le principe des puissances virtuelles est alors :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega(t)} (\mathcal{D}^* : \mathbf{L}) : \delta\mathbf{L} d\Omega &= \int_{\Sigma(t)} \Delta\mathbf{s}^* \cdot \delta\mathbf{v} d\Sigma + \\ &+ (\Delta t) \int_{\Omega(t)} \mathcal{P} : \delta\mathbf{L} d\Omega + \left\{ \int_{\Sigma(t)} \mathbf{t} \cdot \delta\mathbf{v} d\Sigma - \int_{\Omega(t)} \boldsymbol{\sigma} : \delta\mathbf{L} d\Omega \right\}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

où le terme entre accolades représente la contribution des forces non-équilibrées à l'instant  $t$ .

## 3.2 Discrétisation du principe des puissances virtuelles

### 3.2.1 Discrétisation

Afin d'utiliser la méthode des éléments finis, il faut discrétiser le domaine en éléments. Dans cette simulation, nous utilisons un élément isoparamétrique à 6 noeuds décrit plus loin. Les coordonnées  $x_1, x_2, x_3$  sont approximées à l'intérieur de chaque élément par les mêmes fonctions d'interpolation que les vitesses :

$$\mathbf{v} = \sum_A N_A(r, s, t) \mathbf{v}_A,$$



et

$$\mathbf{x} = \sum_{\mathbf{A}} N_{\mathbf{A}}(r, s, t) \mathbf{x}_{\mathbf{A}},$$

où  $r, s, t$  sont les coordonnées canoniques,  $N_{\mathbf{A}}$  les fonctions d'interpolation,  $\mathbf{x}_{\mathbf{A}}$  le vecteur position du noeud  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{v}_{\mathbf{A}}$  sa vitesse.

On peut exprimer les vitesses virtuelles des noeuds grâce aux mêmes relations :

$$\delta \mathbf{v} = \sum_{\mathbf{A}} N_{\mathbf{A}}(r, s, t) \delta \mathbf{v}_{\mathbf{A}}.$$

En dérivant cette dernière relation, on obtient les gradients des vitesses et des vitesses virtuelles respectivement par :

$$\begin{aligned} \delta L_{ij} &= \sum_{\mathbf{A}} N_{\mathbf{A},j} \delta v_{\mathbf{A},i} \\ L_{ij} &= \sum_{\mathbf{B}} N_{\mathbf{B},j} v_{\mathbf{B},i}. \end{aligned}$$

### 3.2.2 Système linéaire

Lorsqu'on introduit ces relations dans (3.6) page 73, on obtient un système linéaire dont les inconnues sont les déplacements nodaux et dont les membres droits sont les increments des forces nodales :

$$[K]\{\Delta u\} = \{\Delta f\}, \quad (3.7)$$

avec

$$\begin{aligned} [K_{\mathbf{AB}}]_{ik} &= \int_{\Omega(t)} N_{\mathbf{A},j} \mathcal{D}_{ijkl}^* N_{\mathbf{B},l} d\Omega, \\ \Delta f_{\mathbf{A}i} &= \Delta s_{\mathbf{A}i}^* + f_{\mathbf{A}i}^{\text{neq}} + p_{\mathbf{A}i}, \\ \Delta s_{\mathbf{A},i} &= \int_{\Sigma(t)} N_{\mathbf{A}} \Delta s_i^* d\Omega, \\ f_{\mathbf{A}i}^{\text{neq}} &= \int_{\Sigma(t)} N_{\mathbf{A}} t_i d\Sigma - \int_{\Omega(t)} \tau_{ij} N_{\mathbf{A},j} d\Omega, \\ p_{\mathbf{A}i} &= (\Delta t) \int_{\Omega(t)} \mathcal{P}_{ij} N_{\mathbf{A},j} d\Omega, \end{aligned}$$

et

$$\Delta u_{\mathbf{B}k} = v_{\mathbf{B}k} \Delta t.$$

L'application du principe au niveau de l'élément conduit à :

$$\sum_b K_{aibj}^e v_{bj}^e = f_{ai},$$

où  $K_{aibj}^e$  est la composante relative au noeud  $a$  suivant la direction  $i$  et au noeud  $b$  suivant la direction  $j$  de la matrice de rigidité.

### 3.3 Actualisation de la configuration et de l'état

#### 3.3.1 Introduction

La résolution du système linéaire (3.7) donne à chaque itération les déplacements des noeuds du maillage. Ensuite, il faut actualiser en chaque point d'intégration toutes les quantités qui dépendent du temps. Deux méthodes d'actualisation ont été utilisées. La première reprend pour les quantités de glissement, les valeurs estimées par la méthode de "forward gradient" et calcule explicitement toutes les autres valeurs. La seconde intègre selon un schéma implicite toutes équations sauf la loi d'écrouissage qui est traitée explicitement. Ce schéma est proposé par Ortiz (communication privée).

#### 3.3.2 Actualisation de la configuration

Pour chaque noeud, on calcule les nouvelles coordonnées :

$$\mathbf{x}(t + \Delta t) = \mathbf{x}(t) + \Delta \mathbf{u}.$$

#### 3.3.3 Actualisation par un schéma explicite : méthode du "Forward Gradient"

Toutes les quantités sont actualisées selon un schéma explicite utilisant les quantités déterminées à l'instant  $t$  :

- les densités de dislocations :

$$\rho^{(s)}(t + \Delta t) = \rho^{(s)}(t) + \frac{1}{b} \left( \frac{1}{L^{(s)}} - 2y_C \rho^{(s)}(t) \right) \Delta \gamma^{(s)},$$

- le tenseur des contraintes de Kirchhoff :

$$\boldsymbol{\tau}(t + \Delta t) = \boldsymbol{\tau}(t) + (\mathbf{c} : \mathbf{D} - \mathbf{W}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}\mathbf{W})\Delta t - \sum_s \Delta \gamma^{(s)} \mathcal{R}^{(s)},$$

- l'orientation du réseau :

$$\mathbf{R}(t + \Delta t) = (\mathbf{I} + \mathbf{W}\Delta t - \sum_s \Delta \gamma^{(s)} \mathbf{W}^{(s)}) \mathbf{R}(t),$$

sauf les quantités de glissement qui sont actualisées en utilisant les cisaillements déterminés par la méthode de "forward gradient" :

$$\Delta \gamma^{(s)} = (f^{(s)} + \mathbf{F}^{(s)} : \mathbf{L}) \Delta t$$

### 3.3.4 Actualisation par une méthode implicite

Si  $g$  est la fonction d'écoulement du matériau,

$$\dot{\gamma}^{(s)} = g \left( \frac{\tau^{(s)}}{\tau_C^{(s)}} \right).$$

L'équilibre du matériau est atteint si :

$$\tau_{n+1}^{(s)} - \tau_{C,n+1}^{(s)} g^{-1} \left( \frac{\Delta \gamma^{(s)}}{\Delta t} \right) = 0.$$

Par la suite, nous désignerons par  $G$  la fonction  $g^{-1}$ , Les variables  $\tau_{n+1}^{(s)}$  et  $\tau_{C,n+1}^{(s)}$  sont les variables à déterminer en fin de pas et sont obtenues au moyen des relations suivantes :

- $\tau_{C,n+1}^{(s)}$  est calculée de façon explicite :

$$\tau_{C,n+1}^{(s)} = \tau_{C,n}^{(s)} + \sum_u h_n^{(su)} |\Delta \gamma^{(u)}|.$$

- la cission résolue est calculée au moyen de la relation :

$$\tau_{n+1}^{(s)} = C_{n+1}^E \bar{\mathbf{H}}_{n+1} : (\bar{\mathbf{g}}^{(s)} \otimes \bar{\mathbf{n}}^{(s)}) = C_{n+1}^E \bar{\mathbf{H}} : \bar{\mathbf{L}}^{(s)}.$$

- le second tenseur de Piola-Kirchhoff  $\bar{\mathbf{H}}$  relatif à la configuration  $\bar{\mathcal{C}}_t$  est calculé au moyen des relations suivantes :

$$\bar{\mathbf{H}}_{n+1} = \bar{\mathbf{c}}^E : \mathbf{E}_{n+1}^E, \quad (3.8)$$

$$\mathbf{E}_{n+1}^E = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_{n+1}^E - \mathbf{I}),$$

$$\mathbf{C}_{n+1}^E = \mathbf{A}_{n+1}^T \mathbf{A}_{n+1}, \quad (3.9)$$

$$\mathbf{A}_{n+1} = \mathbf{A}_n (\mathbf{P}_{n+1}^{-1}), \quad (3.10)$$

$$(\mathbf{P}_{n+1} - \mathbf{P}_n) \mathbf{P}_n^{-1} = \sum_s \Delta \gamma^{(s)} \bar{\mathbf{g}}^{(s)} \otimes \bar{\mathbf{n}}^{(s)}. \quad (3.11)$$

Avec ces équations, l'actualisation des variables d'état peut être ramenée à la recherche des  $\Delta \gamma^{(u)}$  qui vérifient le système :

$$f^{(s)}(\Delta \gamma^{(u)}) = \tau_{n+1}^{(s)} - \tau_{C,n+1}^{(s)} G(\Delta \gamma^{(s)}) = 0.$$

Pour résoudre un tel système, on développe en série cette fonction autour de la solution exacte, soit  $\Delta \gamma_{\star}^{(u)}$  :

$$0 = f^{(s)}(\Delta \gamma_{\star}^{(u)}) = f^{(s)}(\Delta \gamma^{(u)}) + J^{(su)}(\Delta \gamma^{(u)}) (\Delta \gamma_{\star}^{(u)} - \Delta \gamma^{(u)}),$$

où  $J$  est une matrice jacobienne définie par :

$$J^{(su)} = \frac{\partial f^{(s)}}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})}.$$

Ceci revient à adopter un schéma itératif de type Newton-Raphson, qui converge de façon quadratique, soit :

$$\begin{cases} \Delta\gamma_1^{(u)} = 0 \\ J_i^{(su)}(\Delta\gamma_i^{(u)})(\Delta\gamma_{i+1}^{(u)} - \Delta\gamma_i^{(u)}) = -f^{(s)}(\Delta\gamma_i^{(u)}). \end{cases}$$

avec pour  $i$  de 1 au nombre voulu d'itérations et par définition :

$$\begin{cases} d_i^{(s)} = \tau_{C,n+1,i}^{(s)} G'(\Delta\gamma^{(s)}) - \tau_{n+1,i}^{(s)} \\ J_i^{(su)} = \frac{\partial f^{(s)}}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})} \Big|_{\Delta\gamma^{(u)} = \Delta\gamma_i^{(u)}} \end{cases}$$

$$J^{(su)} = \frac{\partial f^{(s)}}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})} = -\frac{\partial\tau_{C,n+1}^{(s)}}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})} G(\Delta\gamma^{(s)}) - \tau_{C,n+1}^{(s)} \frac{\partial G(\Delta\gamma^{(s)})}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})} + \frac{\partial\tau_{C,n+1}^{(s)}}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})}$$

La dérivée de  $\tau_{n+1}^{(s)}$  par rapport à  $\Delta\gamma^{(u)}$  est trouvée en utilisant la relation (3.8) :

$$\frac{\partial\tau_{n+1}^{(s)}}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})} = \left\{ \left( \frac{\partial C_{n+1}^E}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})} \bar{\mathbf{H}}_{n+1} \right) + \left[ \frac{1}{2} C_{n+1}^E : \left( \bar{\mathbf{c}}^E : \frac{\partial C_{n+1}^E}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})} \right) \right] \right\} : \mathbf{L}^{(s)}$$

La dérivée de  $C_{n+1}^E$  par rapport à  $\Delta\gamma^{(u)}$  est calculée en utilisant les relations (3.9), (3.10) et (3.11) :

$$\frac{\partial C_{n+1}^E}{\partial(\Delta\gamma^{(u)})} = -2 \left[ C_{n+1}^E \mathbf{L}^{(u)} \left( \mathbf{I} + \sum_s \Delta\gamma^{(s)} \bar{\mathbf{g}}^{(s)} \otimes \bar{\mathbf{n}}^{(s)} \right)^{-1} \right]^S$$

### 3.3.5 Comparaison entre les deux méthodes

L'avantage de cette méthode par rapport à la précédente est le respect total de l'équilibre du matériau. La solution est atteinte avec une erreur qui diminue de façon quadratique et donc améliore la vitesse de convergence. Il existe cependant des cas où le schéma de Newton-Raphson ne converge pas, ce qui est probablement dû à la non-cohérence de la méthode d'actualisation avec le calcul de la matrice de rigidité. Les forces non-équilibrées générées à chaque pas sont alors grandes. Il existe une méthode pour intégrer les équations suivant le même schéma que l'actualisation fondée sur l'utilisation de tangentes cohérentes pour calculer la matrice de rigidité. Cette méthode exige, si on souhaite l'employer, le développement de nouveaux algorithmes et l'écriture de nouvelles routines de calculs que nous n'avons pas entrepris à cause du temps nécessaire pour une telle tâche.

## 3.4 Gestion des conditions aux limites de type mors mobiles

### 3.4.1 Présentation du problème

Il a déjà été évoqué (page 20) la nécessité d'utiliser des mors à couteaux (voir figure 3.1) pour les essais de traction sur monocristaux. Il est impossible de simuler de tels objets avec les conditions aux limites classiques en vitesses ou forces imposées que l'on a avec les éléments finis et une théorie spéciale a dû être développée pour obtenir les équations supplémentaires correspondant aux degrés de liberté des mors.

Le mors  $\mathcal{M}$  est défini par les coordonnées  $\mathbf{x}_{\mathcal{M}}$  d'un de ses points caractéristiques, la vitesse de translation de ce point  $\mathbf{v}_{\mathcal{M}}$ , la vitesse de rotation  $\boldsymbol{\omega}_{\mathcal{M}}$  du mors autour du point caractéristique et la liste des noeuds en contact. On considère que le mors est un objet qui ne peut avoir qu'un mouvement de corps rigide et qu'il ne peut y avoir de glissement entre les noeuds en contact et le mors. Pour un mors à six degrés de liberté, on ajoute 6 inconnues au système linéaire : les trois vitesses de translation et les trois vitesses de rotation. Tous les noeuds en contact avec le mors ne sont plus des inconnues, les équations correspondantes sont supprimées.

### 3.4.2 Equilibre du mors

Si un noeud A est en contact avec le mors  $\mathcal{M}$ , sa vitesse est donnée par :

$$\mathbf{v}_A = \mathbf{v}_{\mathcal{M}_A} + \dot{\boldsymbol{\omega}}_{\mathcal{M}_A} \times (\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{\mathcal{M}_A})$$

où l'indice  $\mathcal{M}_A$  désigne le mors  $\mathcal{M}$  en contact avec le point A. Cette équation peut être écrite sous forme matricielle :

$$\{v_A\} = [v_{\mathcal{M}_A}] - [R_A]\{\dot{\boldsymbol{\omega}}_{\mathcal{M}_A}\},$$

où :

$$[R_A] = \begin{bmatrix} 0 & -(x_{A3} - x_{O3}) & x_{A2} - x_{O2} \\ x_{A3} - x_{O3} & 0 & -(x_{A1} - x_{O1}) \\ -(x_{A2} - x_{O2}) & x_{A1} - x_{O1} & 0 \end{bmatrix} \text{ et } \{\dot{\boldsymbol{\omega}}_{\mathcal{M}_A}\} = \left\{ \begin{array}{l} \dot{\omega}_1 \\ \dot{\omega}_2 \\ \dot{\omega}_3 \end{array} \right\}.$$

Le mors est en équilibre si :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\mathcal{M}} &= \sum_{A \in \mathcal{M}} \mathbf{t}_A \\ \mathbf{M}_{\mathcal{M}} &= \sum_{A \in \mathcal{M}} (\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_{\mathcal{M}_A}) \times \mathbf{t}_A \end{aligned}$$

$\mathbf{t}_A$  est la réaction de l'éprouvette au noeud A,  $\mathbf{F}_{\mathcal{M}}$  et  $\mathbf{M}_{\mathcal{M}}$  sont respectivement la force et le couple au point caractéristique exercés sur le mors par les noeuds en

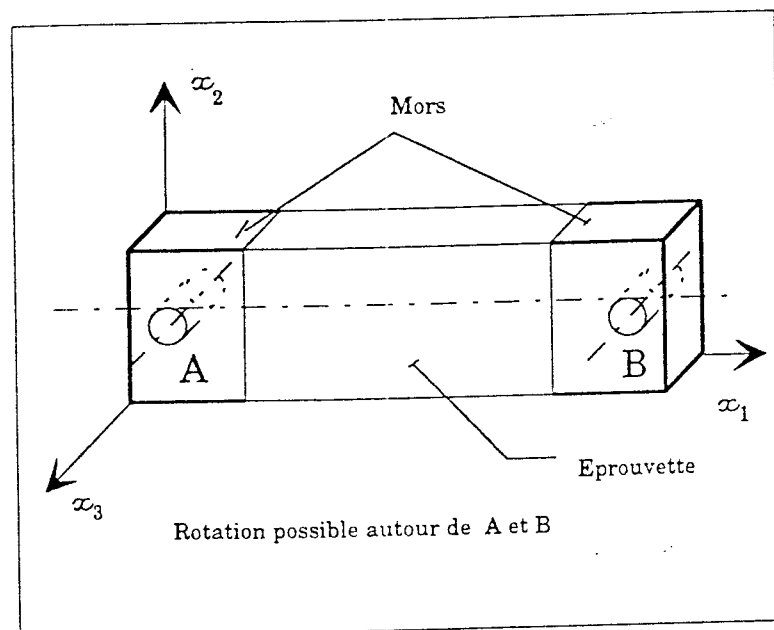


Figure 3.1: Exemple schématique de mors à couteaux simples pour tirer une éprouvette

contact. Après quelques calculs, ces équations se mettent sous la forme incrémentale suivante :

$$\begin{aligned}\{\Delta F_{\mathcal{M}}\} &= \sum_{A \in \mathcal{M}} \{\Delta s_A\}, \\ \{\Delta M_{\mathcal{M}}\} &= \sum_{A \in \mathcal{M}} ([R_A]\{\Delta s_A\} + [L_A]\{\Delta \omega_{\mathcal{M}_A}\}).\end{aligned}$$

La matrice  $[L_A]$  est définie par :

$$L_{Aij} = (x_{Ai} - x_{\mathcal{M}i})t_{Aj} - (x_{Am} - x_{\mathcal{M}m})t_{Am}\delta_{ij}$$

En introduisant les expressions du déplacement des noeuds en contact avec les mors dans l'équation 3.7, page 74, on obtient l'expression donnant l'équilibre d'un noeud A quelconque :

$$\sum_{B \notin \mathcal{M}} [K_{AB}]\{\Delta u_B\} + \sum_{B \in \mathcal{M}} [K_{AB}](\{u_{\mathcal{M}_B}\} + [R_B]\{\Delta \omega_{\mathcal{M}_B}\}) = \{\Delta f_A\}.$$

L'incrément  $\{\Delta s_A\}$  de la force exercée par le mors  $\mathcal{M}$  sur le noeud  $A \in \mathcal{M}$  satisfait à l'équation :

$$\sum_{B \notin \mathcal{M}} [K_{AB}]\{\Delta u_B\} + \sum_{B \in \mathcal{M}} [K_{AB}](\{u_{\mathcal{M}_B}\} + [R_B]\{\Delta \omega_{\mathcal{M}_B}\}) = \{\Delta s_A\} + \{\Delta p_A\}.$$

En introduisant cette expression dans les équations d'équilibre du mors, il vient :

$$\begin{aligned}\sum_{A \in \mathcal{M}} \sum_{B \notin \mathcal{M}} [K_{AB}]\{\Delta u_B\} + \sum_{A \in \mathcal{M}} \sum_{B \in \mathcal{M}} [K_{AB}](\{\Delta u_{\mathcal{M}_B}\} + [R_B]^T\{\Delta \omega_{\mathcal{M}_B}\}) \\ = \{\Delta F_{\mathcal{M}_A}\} + \sum_{A \in \mathcal{M}} \{p_A\},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\sum_{A \notin \mathcal{M}} \sum_{B \in \mathcal{M}} [R_A][K_{AB}]\{\Delta u_B\} \\ + \sum_{A \in \mathcal{M}} \sum_{B \in \mathcal{M}} [R_A][K_{AB}](\{\Delta u_{\mathcal{M}_B}\} + [R_B]^T\{\Delta \omega_{\mathcal{M}_B}\}) + \sum_{A \in \mathcal{M}} \{L_A\}\{\Delta \omega_{\mathcal{M}_A}\} \\ = \{\Delta M_{\mathcal{M}_A}\} + \sum_{A \in \mathcal{M}} [R_A]\{p_A\},\end{aligned}$$

Pour chaque mors  $\mathcal{M}$ . Ce qui correspond à une équation supplémentaire par degré de liberté de chaque mors.

### 3.4.3 Nouveau système linéaire

Le système linéaire complet à résoudre est finalement :

- Pour les noeuds n'appartenant à aucun mors,

$$\sum_{B \notin \mathcal{M}} [K_{AB}] \{\Delta u_B\} + \sum_{B \in \mathcal{M}} [K_{AB}] (\{u_{\mathcal{M}_B}\} + [R_B] \{\Delta \omega_{\mathcal{M}_B}\}) = \{\Delta f_A\},$$

- Pour les trois translations de chaque mors  $\mathcal{M}$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{A \in \mathcal{M}} \sum_{B \notin \mathcal{M}} [K_{AB}] \{\Delta u_B\} + \sum_{A \in \mathcal{M}} \sum_{B \in \mathcal{M}} [K_{AB}] (\{\Delta u_{\mathcal{M}_B}\} + [R_R]^T \{\Delta \omega_{\mathcal{M}_B}\}) \\ = \{\Delta F_{\mathcal{M}_A}\} + \sum_{A \in \mathcal{M}} \{p_A\}, \end{aligned}$$

- pour les trois rotations pour chaque mors  $\mathcal{M}$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{A \notin \mathcal{M}} \sum_{B \in \mathcal{M}} [R_A] [K_{AB}] \{\Delta u_B\} \\ + \sum_{A \in \mathcal{M}} \sum_{B \in \mathcal{M}} [R_A] [K_{AB}] (\{\Delta u_{\mathcal{M}_B}\} + [R_R]^T \{\Delta \omega_{\mathcal{M}_B}\}) + \sum_{A \in \mathcal{M}} \{L_A\} \{\Delta \omega_{\mathcal{M}_A}\} \\ = \{\Delta M_{\mathcal{M}_A}\} + \sum_{A \in \mathcal{M}} [R_A] \{p_A\}, \end{aligned}$$

Les deux dernières séries d'équations sont écrites pour chaque degré de liberté des mors.  $\mathcal{M}$  varie de 1 au nombre de mors de l'éprouvette. En traction ce nombre est 2. La prise en compte de telles conditions rend la matrice de rigidité non-symétrique et impose l'utilisation d'un solveur non-symétrique.

### 3.4.4 Commentaire

Les mors que nous avons définis permettent d'imposer, si on le souhaite, des conditions aux limites de types mors mobiles mais également d'autres types de conditions puisqu'il y a une latitude pour imposer trois rotations et trois déplacements à des objets liés de façon rigide à l'éprouvette. Le traitement d'autres essais (cisaillement, mors à un seul couteau, etc...) est alors envisageable.



## 3.5 Structure algorithmique du programme informatique

### 3.5.1 Généralités sur le code

Le code a été écrit en FORTRAN 77. La structure est modulaire et une attention particulière a été portée sur la conservation d'un maximum de généralité afin de pouvoir interchanger aisément des routines de calcul. Il est possible, par exemple, bien qu'un seul type d'élément ait été utilisé dans la simulation, d'implanter par l'échange de deux routines d'autres types d'éléments. Les modules concernant la loi suivent également la même règle.

Des procédures effectuent en cours d'exécution une sauvegarde régulière des données qui autorise une reprise de la simulation en cas d'interruption accidentelle des calculs, suite à une coupure de courant par exemple. Une sauvegarde des variables intéressantes est également effectuée régulièrement pour effectuer un post-traitement sur ces données et obtenir des informations sur l'état de l'éprouvette en cours de simulation : géométrie de l'éprouvette, quantités de déformation, densités de dislocations...

Le programme comporte environ 3800 lignes et représente 140000 octets de code source. Un ensemble de routines a également été développé afin d'assurer le post-traitement des données.

### 3.5.2 Algorithme principal

L'algorithme principal est présenté figure 3.2.

### 3.5.3 Algorithme du calcul des variables pour un incrément

L'algorithme est présenté figure 3.3.

### 3.5.4 Informations techniques

**Stockage de la matrice** On a adopté un stockage de type profil (on retient tous les éléments au dessus de la diagonale jusqu'au dernier élément non-nul). Lorsque les conditions aux limites sont des mors, la matrice est non-symétrique, ce qui impose la sauvegarde des parties supérieure et inférieure de la matrice. Dans le cas symétrique, le solveur utilise la méthode de résolution de Choleski et dans le cas avec mors, la méthode de Gauss avec recherche de pivot. Tous les termes, pour lesquels le déplacement est connu, sont passés au second membre.

**Gestion des mors** Toutes les grandeurs relatives aux mors sont stockées dans une zone commune. Les informations retenues sont :

**Début**

- Lire les paramètres de la simulation : nombre d'incrément, nombre de noeuds, d'éléments, le pas de temps, nombre de mors...
- Si nouvelle simulation
  - Initialiser les données du programmes
- Sinon reprise de calcul
  - lire le fichier de sauvegarde
- Fin si
- BOUCLE DES INCREMENTS
- Pour  $i=1$  au nombre final d'incréments
  - Calculer les variables pour un incrément
  - Editer des informations si nécessaire
  - Sauvegarder des données si nécessaire
- Fin pour
- Sauvegarder les informations nécessaires
- Messages d'information

**Fin**

Figure 3.2: Algorithme principal du programme

- orientation des mors,
- vitesses de déplacement et de rotation
- paramètres imposés (vitesse ou rotation, force ou couple).

Il existe également un tableau qui affecte un numéro de mors à chaque noeud en contact avec chaque mors, 0 sinon. Ce tableau est utile pour établir le profil de la matrice de résolution et pour la construction de cette même matrice. Tous les termes pour lesquels le déplacement est connu (déplacement ou rotation imposés) sont passés au second membre lors de la construction du système linéaire.

### 3.5.5 Le post-traitement des données

#### Les données disponibles

Afin de dépouiller les données de la simulation, nous avons mis au point diverses routines de traitement des données. Pour chaque simulation, il est possible de visualiser :

- les isovaleurs de chaque composante du tenseur des contraintes,
- la courbe  $(\tau, \gamma)$  globale calculée à partir des forces en bout d'éprouvette et du déplacement global et des formules page 13,
- la courbe  $(\tau, \gamma)$  locale en n'importe quel point d'intégration de n'importe quel élément,
- la trace des lignes de glissement sur l'éprouvette.

Pour chaque point d'intégration, pour chaque système de glissement : la densité de dislocations, la cission résolue, la cission critique, le glissement accumulé et l'orientation sont des grandeurs également accessibles.

#### Les contraintes

L'utilisation des routines de visualisation de MODULEF<sup>3</sup> pour générer des isovaleurs imposent le calcul de la valeur des contraintes aux noeuds du maillage. Comme ces valeurs sont stockées aux points d'intégration, un post-traitement a été développé pour les extrapoler au points d'intégration. Les contraintes aux noeuds sont déterminées en faisant la moyenne des contraintes des éléments dont le noeud fait partie.

$$\bar{\sigma}_{noeud} = \frac{1}{Nelt} \sum_{el=1}^{Nelt} \sigma^{el},$$

Nelt est le nombre des éléments auxquels le noeud appartient,  $\sigma^{el}$  est le tenseur de contraintes dans l'élément  $el$  et  $\bar{\sigma}_{noeud}$  est le tenseur moyen obtenu au noeud considéré.

---

<sup>3</sup>MODULEF est une bibliothèque de programmes consacrés à la résolution par la méthode des éléments finis de problèmes généraux. La bibliothèque est constituée des programmes de chacun des utilisateurs. La nature modulaire de la bibliothèque permet la modification ou l'ajout de routines de calculs et de visualisation.

### La courbe $(\tau, \gamma)$ locale

La courbe locale de cission critique en fonction du glissement résolu est obtenue en extrayant en un élément choisi, en un point d'intégration choisi les valeurs de la cission critique et du glissement accumulé. C'est une information locale qui ne témoigne pas du comportement moyen du monocristal. En un point particulier du monocristal, il peut y avoir du glissement simple alors que l'éprouvette est en moyenne en glissement double sur l'ensemble des éléments.

### La courbe $(\tau, \gamma)$ globale

Cette courbe est obtenue en calculant les forces en bout de l'éprouvette et la déformation longitudinale. On utilise alors les formules (1.3) et (1.4) de la page 13 en glissement simple. Le calcul en glissement double se fait en utilisant les formules (1.5) et (1.6). Il faut considérer cette courbe comme une information moyenne. C'est l'information qui peut être comparée aux courbes données de la littérature. Le choix de la zone déformée pour le calcul de la déformée longitudinale est épineux. Nous avons choisi de considérer la portion de l'éprouvette dans laquelle les quantités de glissement sont homogènes.

### Le tracé des lignes de glissement

Le tracé des lignes de glissement est une présentation des résultats pratique pour la comparaison avec les résultats expérimentaux. On donne ici le principe de la détermination. La face de l'éprouvette est composée des faces triangulaire des éléments. Pour chaque élément, on recherche l'équation de l'intersection du plan de glissement avec la face triangulaire de l'élément (les faces triangulaires des éléments composent la face de l'éprouvette voir figure 3.4). On vérifie ensuite que la direction de glissement n'est pas parallèle à la face car sinon, il n'y a pas de production de marche à la surface de l'éprouvette. La partie de la droite contenue dans la face triangulaire est seule tracée. On donne ici l'algorithme de résolution d'une telle méthode.

- $\mathbf{n}$  et  $\mathbf{g}$  sont la normale et la direction du système de glissement.
- $P_1, P_2, P_3$  sont les trois sommets de la face triangulaire de l'élément contenue dans le plan  $x_1x_2$
- $P_0$  est le centre du triangle

si  $g_3$ , projection de  $\mathbf{g}$  sur  $x_3$ , est différent de 0 alors la trace est visible, sinon elle ne l'est pas.

On recherche l'intersection de la trace du plan dans  $x_1x_2$  définie par  $P_0 + \lambda_1 \vec{v}$  avec les droites  $D_i, i = 1, 3$  définissant le contour de l'élément dans le plan  $x_1x_2$ .  $\vec{v}$  a pour composantes  $(-g_2, g_1, 0)$ . La droite  $D_i$  est définie par  $P_i + \lambda_2 \vec{w}_i$ ,  $\vec{w}_i$  est donnée

Début

- Calculer la matrice de rigidité
- Résoudre le système  $[K]\{\Delta u\} = \Delta f$
- Actualiser les paramètres des mors
- Actualiser la géométrie de l'éprouvette
- Actualiser les variables stockées en chaque point d'intégration

Fin

Figure 3.3: Algorithme de calcul des variables pour un incrément

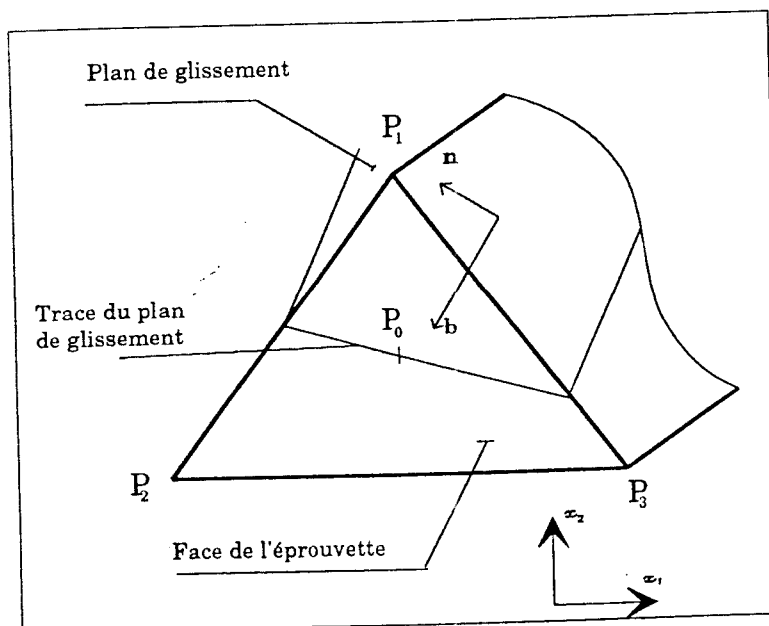


Figure 3.4: Trace d'un plan de glissement sur une face de l'éprouvette

par  $P_i\vec{P}_{i+1}$  ou  $P_4 = P_1$  pour le cas particulier du dernier segment. Pour chaque arête du contour, ces intersections sont déterminées par la résolution du système :

$$\lambda_{1i}\vec{v} = \lambda_{2i}\vec{w}_i + P_0\vec{P}_i$$

$$\lambda_{1i} = \frac{\begin{vmatrix} P_{i1} - P_{01} & -w_{i1} \\ P_{i2} - P_{02} & -w_{i2} \end{vmatrix}}{\det} \quad \lambda_{2i} = \frac{\begin{vmatrix} v_{i1} & P_{i1} - P_{01} \\ v_{i2} & P_{i2} - P_{02} \end{vmatrix}}{\det}$$

$$\det = \begin{vmatrix} v_{i1} & -w_{i1} \\ v_{i2} & -w_{i2} \end{vmatrix}$$

On considérera les intersections pour lesquelles  $\lambda_{2i}$  est compris entre 0 et 1, auquel cas l'intersection se trouve sur le segment  $P_iP_{i+1}$ . Cette méthode permet le calcul de deux intersections de la trace du plan avec la face de l'éprouvette pour un élément considéré. Ces coordonnées sont passées à MODULEF qui se charge du tracé sur la face correspondante.

### Données diverses

Les valeurs des variables en chaque point d'intégration sont sauvegardées périodiquement. Il est possible d'extraire par élément et par point d'intégration les valeurs prises au cours de la simulation par la cission critique, la cission résolue, l'orientation, les densités des dislocations, les composantes du tenseur des contraintes de Cauchy.



# Chapitre 4

## Simulation de l'essai de traction

### 4.1 Description de l'éprouvette

#### 4.1.1 L'élément fini utilisé

L'éprouvette est maillée au moyen d'éléments prismatiques à 6 noeuds et deux points d'intégration. Ces éléments sont assemblés 4 par 4 pour former des cellules parallépipédiques.

#### 4.1.2 Maillage de l'éprouvette

L'éprouvette de traction est maillée au moyen des cellules décrites au paragraphe précédent et a une forme parallépipédique. Les faces triangulaires des éléments constituent la face principale de l'éprouvette. La normale de cette face est  $x_3$ . La direction de traction est colinéaire à  $x_1$ . Les dimensions de l'éprouvette sont :  $L$  la longueur (direction  $x_1$ ) ;  $l$  la largeur (direction  $x_2$ ) et  $e$  l'épaisseur (direction  $x_3$ ). Un exemple de maillage est donné figure 4.1. Le maillage est réalisé de façon automatique par programme. La largeur de bande de la matrice du système linéaire est minimisée si les numéros des noeuds sont incrémentés d'abord dans les directions qui comportent le moins d'éléments<sup>1</sup>. Dans le cas de l'éprouvette présentée, on numérote suivant 3, puis 2 et 1.

#### 4.1.3 Les conditions aux limites

##### Les différents types de conditions aux limites

Les conditions aux limites s'appliquent aux noeuds d'extrémités de l'éprouvette, c'est-à-dire les noeuds d'abscisse nulle et les noeuds d'abscisse  $L$ . Dans ce chapitre, trois types de conditions aux limites ont été utilisées :

---

<sup>1</sup>Une mauvaise numérotation peut doubler les temps de calcul



1. mors fixes - on impose aux noeuds une vitesse  $v_1$  suivant la direction  $x_1$  et une vitesse nulle suivant les deux autres directions.
2. mors à double couteaux - Les noeuds d'extrémités sont en contact avec un mors dont la vitesse suivant  $x_1$  est  $v_1$  et dont les rotations sont libres autour de  $x_2$  et  $x_3$  ; tous les autres degrés de liberté sont supprimés.
3. la vitesse des noeuds d'extrémités suivant la direction  $x_1$  est imposée ; tous les autres degrés de libertés ne sont pas imposés.

### Conditions de type mors fixes à chaque extrémité

- Pour chaque noeud I du maillage
  - Si  $X(1,I) = 0$  (noeud sur la petite face gauche)
    - \* vitesse imposée 0 dans les trois directions
  - Sinon si  $X(1,I) = L$  (noeud sur la petite face droite)
    - \* Vitesse imposée 0 suivant la direction  $x_2$  et  $x_3$
    - \* Vitesse imposée  $v_1$  suivant  $x_1$
  - Fin si
- Fin pour

Ces conditions correspondent au cas expérimental où on tire sur l'éprouvette avec des mors fixes. Les têtes de l'éprouvette sont maintenues dans l'axe de traction et ceci génère des efforts parasites consistant en un effort tranchant  $T$  perpendiculaire à l'axe et en un couple  $C$ .

**Conditions de type mors à double couteaux à chaque extrémité**

Conditions sur les noeuds d'extrémité :

- Pour chaque noeud I du maillage
  - Si  $X(1,I) = 0$  (noeud sur la petite face gauche)
    - \* Le noeud  $\in$  au mors 1
  - Sinon si  $X(1,I) = L$  (noeud sur la petite face droite)
    - \* Le noeud  $\in$  au mors 2
  - Fin si
- Fin pour

Conditions sur les mors :

- Pour le mors 1 (mors gauche)
  - Vitesses imposées 0 suivant les trois directions
  - Vitesse de rotation imposée 0 autour de  $x_1$
  - Couples nuls autour de  $x_2$  et  $x_3$
- pour le mors 2 (mors droit)
  - Vitesses imposées  $v_1$  suivant  $x_1$
  - Vitesse imposée 0 suivant la direction  $x_2$  et  $x_3$
  - Vitesse de rotation imposée 0 autour de  $x_1$
  - Couples nuls autour de  $x_2$  et  $x_3$

Ces conditions qui sont proches de celles appliquées expérimentalement sont destinées à minimiser l'effort tranchant à l'intérieur de l'éprouvette.

### Vitesse imposée suivant la direction de traction

Conditions sur les noeuds d'extrémités :

- Pour chaque noeud I du maillage
  - Si  $X(1,I) = 0$  (noeud sur la petite face gauche)
    - \* vitesse imposée 0 suivant  $x_1$
  - Sinon si  $X(1,I) = L$  (noeud sur la petite face droite)
    - \* Vitesse imposée  $v_1$  suivant  $x_1$
  - Fin si
- Fin pour

Pour ces conditions aux limites, le maintien dans l'axe des têtes de l'éprouvette est supprimé. L'effort tranchant est nul et de ce fait, on diminue l'influence des conditions aux limites. Ce type de conditions sera utilisé pour la comparaison de divers essais dont on fait varier les paramètres. L'avantage d'une telle procédure est que les maillages utilisés sont plus petits donc le temps de calcul est diminué, par contre, on s'éloigne des conditions réelles d'essai. Pour le cas où ces dernières conditions sont utilisées, seule la position relative des courbes simulées sera obtenue.

## 4.2 Ajustement des paramètres et tests numériques

Le programme a été testé pour divers cas pour lesquels on connaît les solutions analytiques. Les résultats concordent. Il faut également effectuer quelques tests pour choisir les paramètres d'entrée. Nous avons essayé d'ajuster au mieux les paramètres suivants : incrément de déformation par pas, valeur du paramètre  $\beta$  de la méthode forward gradient et la valeur du critère de filtrage sur les systèmes de glissement. Tous ces paramètres ont une influence sur le temps de calcul et sur la précision, il importe donc de trouver le bon compromis.

### 4.2.1 Incrément de déformation par pas

Pour comprendre la limitation effective du pas de déformation, il faut considérer l'exemple d'une éprouvette en cisaillement dans un plan parallèle aux bords de l'éprouvette sur lesquels est imposée la sollicitation. Pour obtenir une telle configuration, on choisit de prendre les axes  $[\bar{1}10]$ ,  $[111]$  et  $[\bar{1}\bar{1}2]$  (voir figure 4.2). Dans ce cas un seul système suffit pour accommoder la déformation. Ce résultat doit être retrouvé par le programme.

On montre ici que si les incréments de déformation par pas de calcul sont trop grands, la simulation peut faire intervenir d'autres systèmes.

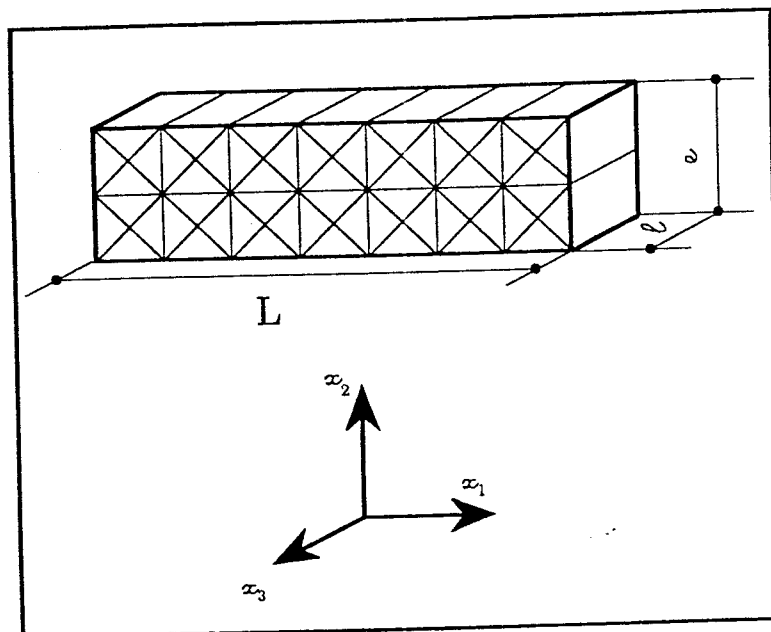


Figure 4.1: Représentation de l'éprouvette, exemple de maillage

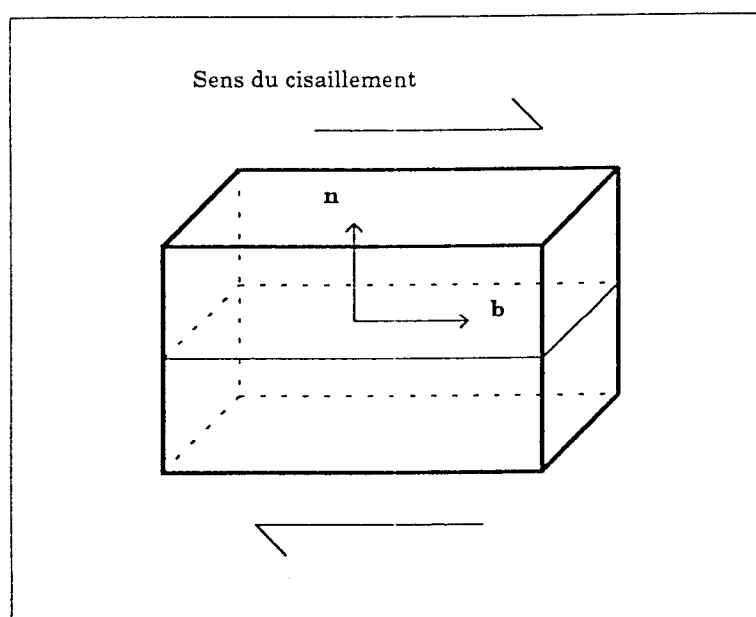


Figure 4.2: Configuration de glissement simple en cisaillement

On suppose qu'à l'état initial les déformations plastiques et les contraintes sont nulles. Le processus de calcul du programme est le suivant : Le programme calcule les déplacements puis actualise les contraintes, les quantités de glissement et les autres paramètres. Si on effectue un pas de déformation, sans vitesses plastiques initiales, la détermination de l'état de contrainte est faite en utilisant la loi élastique (pas de systèmes actifs). La contrainte sur le système 1 le plus sollicité vaut :

$$\tau = \mu \Delta \gamma$$

et

$$\tau = f \mu \Delta \gamma$$

sur le système le plus exposé après 1. f, le facteur de Schmid, vaut 0.667 dans cette configuration.

Si  $\Delta \gamma \geq \frac{\tau_C}{\mu f}$  alors, au pas suivant, le programme détermine que deux systèmes sont actifs et détermine des déformations de l'échantillon qui ne sont pas correctes car la déformation doit être accommodée par un seul système. L'incrément de déformation doit être inférieur à :

$$\frac{\tau_C}{\mu f} \simeq \frac{1}{75.10^3 \times 0.667} \simeq 2.10^{-5}$$

Tous les problèmes sont éliminés lors de la simulation en prenant un incrément par pas de  $2.10^{-6}$ . On a constaté que les simulations ne sont pas meilleures si on prend un pas de  $10^{-7}$ .

### 4.2.2 Choix du paramètre $\beta$

Si  $\beta = 0$  alors le schéma utilisé est explicite et nécessite des pas beaucoup plus petits (50 fois plus petits) pour l'obtention de la solution. Les études classiques montrent que  $\beta = 0,5$  garantit la meilleure précision et une stabilité inconditionnelle. C'est la valeur que nous avons adoptée.

### 4.2.3 Valeur du critère de filtrage sur les systèmes

Du fait de la non-linéarité de la fonction qui permet de calculer la vitesse de glissement en fonction de la cission résolue et la cission critique, la vitesse est quasiment nulle sur le système dès que  $\tau$  devient inférieur à  $\tau_C$ . Pour diminuer les temps de calcul qui sont déjà très longs, il est judicieux d'imposer un filtre sur les valeurs très faibles des vitesses de glissement. On évite de résoudre les systèmes 12x12 de la méthode forward gradient en chaque point d'intégration. Si la valeur de coupure de la vitesse est fixée à  $10^{-50} \text{s}^{-1}$ , en prenant  $a=10^{-3}$  et  $c=100$  dans :

$$\dot{\gamma} = a \left( \frac{\tau}{\tau_C} \right) \left| \frac{\tau}{\tau_C} \right|^{c-1},$$

on trouve que  $\tau$  doit être inférieur à  $0,3\tau_C$ . C'est cette dernière condition qui est utilisée pratiquement pour déterminer si un système doit intervenir dans la simulation.

## 4.3 Simulation d'essais de traction sur les monocristaux dans le cas isotrope

### 4.3.1 Eprouvettes : conditions aux limites et orientation

L'éprouvette a une longueur  $L=30\text{mm}$ , une largeur de  $l=1\text{mm}$  et une épaisseur de  $e=0.2\text{ mm}$ . La largeur et l'épaisseur ont été réduites de façon à minimiser les couples dans l'éprouvette.

Deux orientations sont testées dans cette partie. La première est une orientation qui favorise un glissement double symétrique initial dans l'éprouvette (axe de traction colinéaire à  $[\bar{1}12]$ ), la seconde est une orientation qui favorise un glissement simple à l'intérieur de l'éprouvette (axe de traction colinéaire à  $[\bar{1}25]$ ). Les axes  $x_1$  et  $x_2$  sont choisis pour que le vecteur de Burgers et la normale au plan du premier système soient contenus dans un plan de normale  $x_3$ , c'est-à-dire, dans un plan parallèle à la plus grande face de l'éprouvette (tableau 4.1).

Les conditions aux limites sont de types mors à double couteaux. Le maillage est donné figure 4.3. Les coefficients de la loi de comportement sont ceux donnés dans la table 2.3. Les systèmes actifs prédits par une analyse au moyen des facteurs de Schmid sont donnés table 4.2.

### 4.3.2 Analyse des résultats pour l'éprouvette orientée pour le glissement double

#### Courbes $(\tau, \gamma)$

On présente la courbe obtenue de façon globale et la courbe locale au niveau d'un élément central de l'éprouvette (figure 4.4<sup>2</sup>).

Les valeurs mesurées sur la courbe locale correspondent avec celles utilisées pour l'identification. On note le bon accord entre la pente initiale de la courbe simulée (290 MPa) et la valeur de la pente utilisée pour l'identification du modèle (300 MPa). A partir d'une certaine densité de dislocations sur les deux systèmes actifs, l'annihilation est non-négligeable et la courbe s'infléchit fortement (stade III). La courbe globale est située en dessous de la courbe locale car il se produit une localisation progressive de la déformation au centre de l'éprouvette.

On donne figure 4.5 l'évolution des densités de dislocations sur les systèmes actifs. Les densités des deux systèmes restent égales durant toute la déformation.

<sup>2</sup>Nous utilisons trois types de courbes. Pour les repérer, nous avons associé l'abréviation CL aux courbes locales, CGS aux courbes globales calculées en glissement simple et CGD pour les courbes calculées en glissement simple puis double ou directement en glissement double.

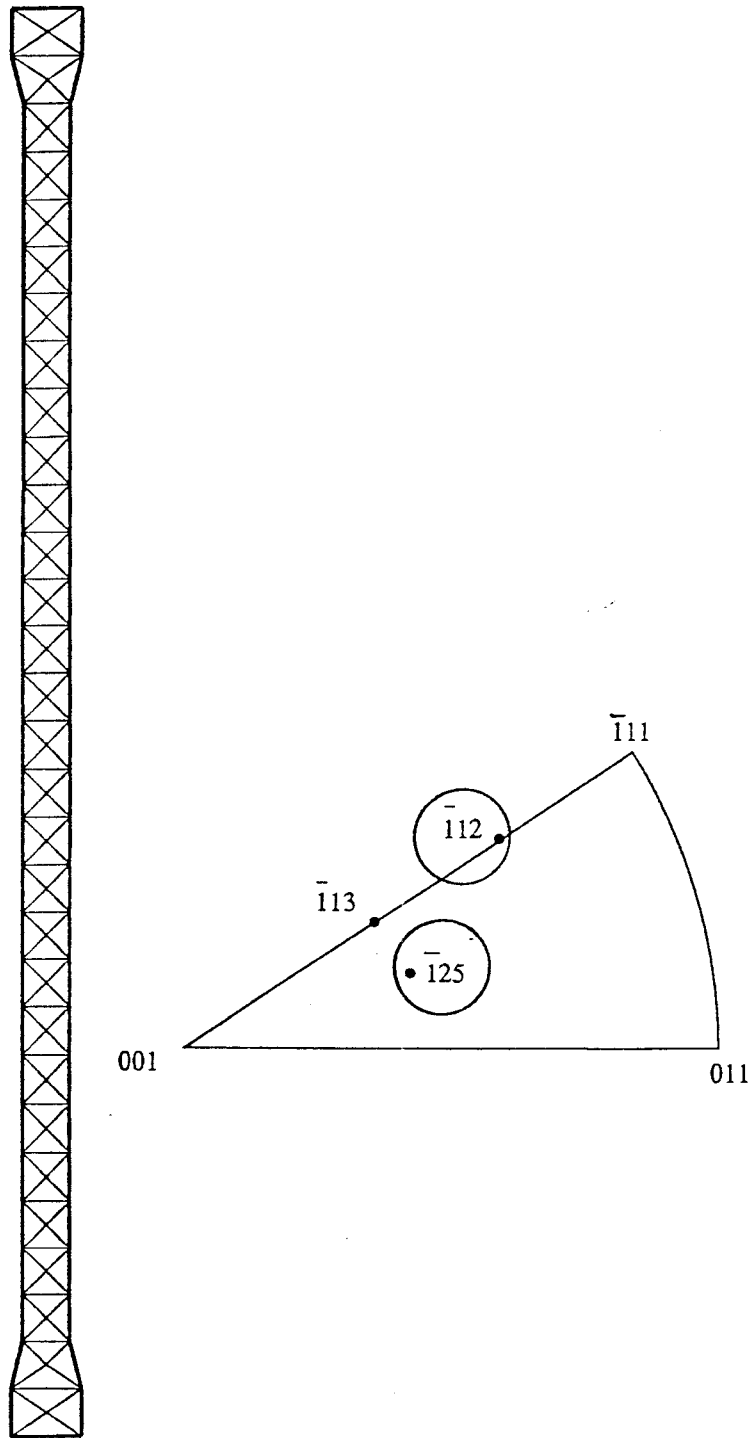


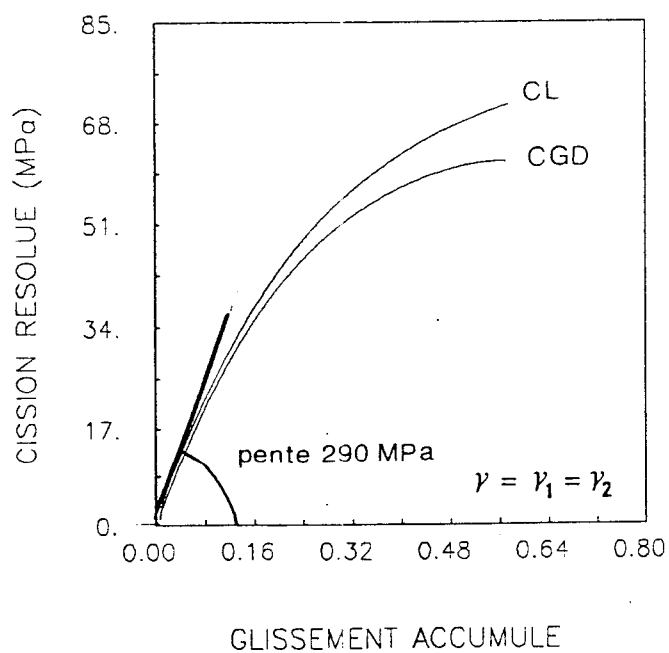
Figure 4.3: Maillage de l'éprouvette en traction et orientations initiales

	$x_1$	$x_2$	$x_3$
Orientation 1	$[\bar{1}12]$	$[\bar{1}10]$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
Orientation 2	$[\bar{1}25]$	$[\bar{2}10]$	$[\bar{1}\bar{2}1]$

Tableau 4.1: Orientations des éprouvettes

Orientation	Nature du glissement	Direction de glissement	Normale au plan de glissement
1	double initial	$\bar{1}01$ $011$	$111$ $\bar{1}\bar{1}1$
2	glissement simple puis glissement double	$\bar{1}01$ $\bar{1}01$ $011$	$111$ $111$ $\bar{1}\bar{1}1$

Tableau 4.2: Systèmes de glissement actifs dans le cas des deux orientations choisies

Figure 4.4: Courbes  $(\tau, \gamma)$  simulées en glissement double dans le cas isotrope



### 4.3.3 Analyse des résultats pour l'éprouvette orientée pour un glissement simple initial

#### Les différents stades de la déformation

Le système initialement actif est effectivement celui prédit par la loi de Schmid. Au cours de la phase de glissement simple, l'axe de traction se rapproche de l'axe  $[\bar{1}13]$  à cause de la rotation du réseau due au glissement du premier système. Dans les éléments près des mors, il existe un glissement multiple sur deux voire trois systèmes.

A mi-parcours entre l'axe  $[\bar{1}25]$  et l'axe  $[\bar{1}13]$ , le système secondaire entre en activité. Toutefois son activité est moins importante que celle du premier système. Une très faible activité existe sur des systèmes autres que le système secondaire ( $\gamma \simeq 10^{-5}$ ).

Lorsque l'axe  $[\bar{1}13]$  est atteint, l'axe de traction se déplace sur la zone symétrique  $[001][\bar{1}11]$  en direction de l'axe  $[\bar{1}12]$ . La densité des dislocations augmente sur les deux systèmes de façon similaire, jusqu'à ce qu'elle se stabilise pour cause d'annihilation. On donne tableau 4.3 les grandeurs caractéristiques simulées pour cet essai.

#### Courbe $(\tau, \gamma)$ locale

L'éprouvette présente une zone homogène de déformation sur environ 15 millimètres (longueur totale initiale 30 mm). On présente figure 4.6 le tracé d'une courbe  $(\tau, \gamma)$  locale obtenue en extrayant les valeurs en un point d'intégration situé au centre de l'éprouvette. Les trois stades expérimentaux apparaissent sur cette courbe.

La pente du stade I est 14 MPa. Pour une déformation de 0,14 on relève dans les éléments centraux une activité de  $10^{-5}$  sur le système  $(\bar{1}11)[101]$ . Cette activité, probablement due aux contraintes supplémentaires générées par les conditions aux limites, reste de cet ordre de grandeur durant le reste de la simulation.

La pente du stade II est 175 MPa. Cette valeur est plus faible que la valeur trouvée lorsque le glissement est double initialement. Le glissement double démarre avant que l'axe de traction se trouve sur la zone de symétrie à cause de la viscosité et des contraintes supplémentaires à l'intérieur de l'éprouvette. Son activité n'est cependant pas aussi importante qu'en glissement double symétrique, ce qui explique que la pente du stade II soit plus faible.

#### Courbes $(\tau, \gamma)$ globales

On dispose de deux types de formules pour calculer les courbes (glissement simple ou glissement double).

Dans ce cas (voir figure 4.7), on constate que les formules établies pour le glissement simple (1.3) et (1.4) conviennent à la description du stade I en prenant pour  $l_0$ , la longueur homogène de déformation (15mm).

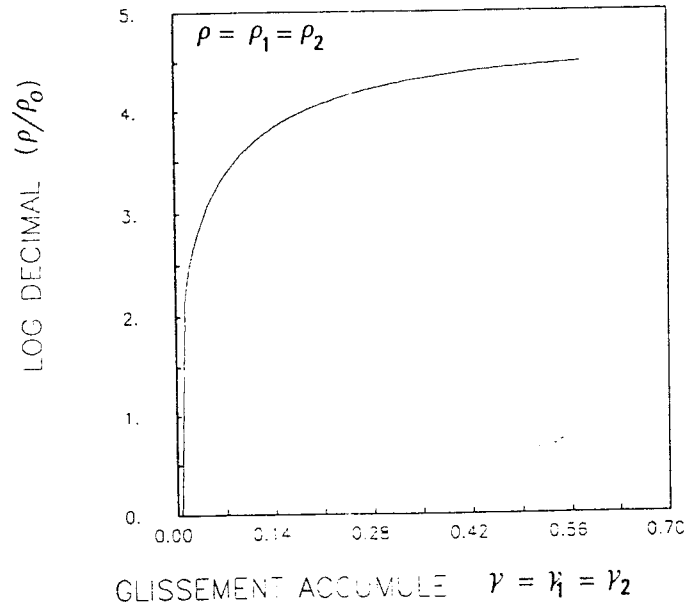


Figure 4.5: Evolution des densités de dislocations pour l'éprouvette orientée en glissement double en fonction de la déformation

point	$\tau^{(1)}$ (MPa)	$\gamma^{(1)}$	$\rho^{(1)}$ $\text{m}^{-2}$	$\rho^{(2)}$ $\text{m}^{-2}$	écart $\bar{1}25$	écart $\bar{1}13$
0	0	0	$1,2 \times 10^9$	$1,2 \times 10^9$	0	$7,7^\circ$
1	6	0,15	$5,3 \times 10^{11}$	$1,2 \times 10^9$	$3,1^\circ$	$4,3^\circ$
2	34	0,5	$8,510^{12}$	$7,9210^{12}$	$8,1^\circ$	$0,6^\circ$
3	65	0,74	$2,710^{13}$	$2,710^{13}$		$2^\circ$

Tableau 4.3: Grandeurs caractéristiques simulées pour l'éprouvette orientée  $\bar{1}25$

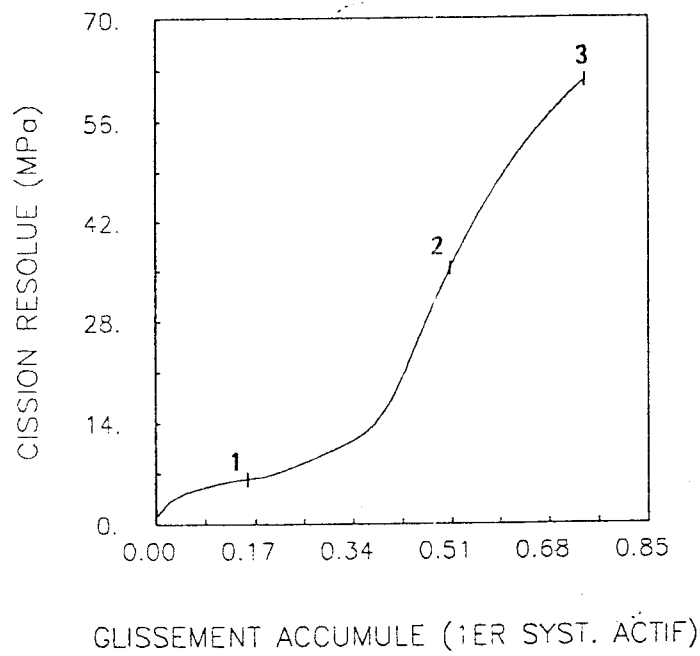


Figure 4.6: Courbe  $(\tau, \gamma)$  simulée locale pour une éprouvette orientée en glissement simple initial et le cas isotrope

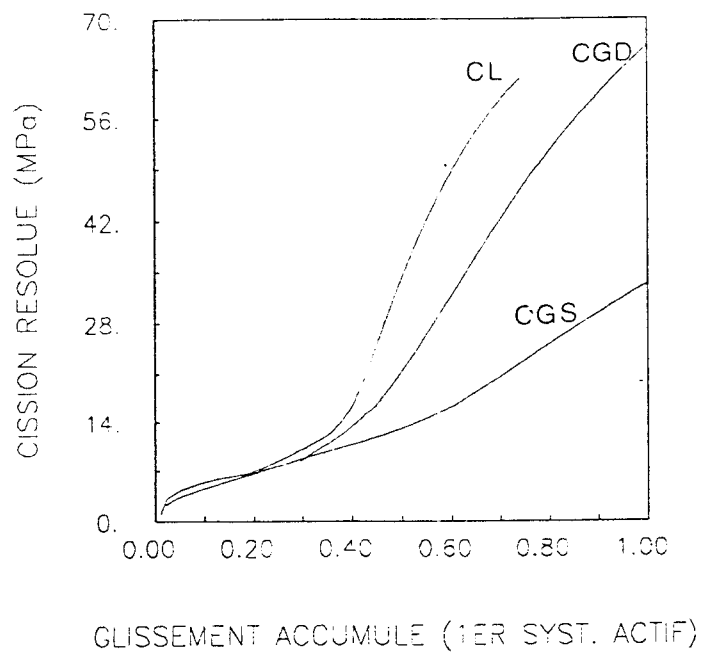


Figure 4.7: Courbes  $(\tau, \gamma)$  simulées globales pour une éprouvette orientée en glissement simple et la loi isotrope

Dès que le glissement double apparaît dans l'éprouvette, la courbe de glissement simple n'est plus adaptée à la description du comportement donné par la courbe locale. Lorsque deux systèmes sont actifs, la courbe globale est calculée au moyen des formules (1.5) et (1.6). Les deux courbes locales et globales ne se superposent pas tout à fait. La superposition exacte est cependant possible en jouant sur le choix de la longueur homogène de l'éprouvette et sur la détermination du moment où l'éprouvette passe en glissement double. Il est difficile de donner une règle quant au choix de ces deux paramètres car leur détermination est plutôt subjective.

### Evolution des densités de dislocations

On donne figure 4.8 l'évolution des densités de dislocations primaires et secondaires au cours de la déformation pour un élément central de l'éprouvette. En stade I, la densité de dislocations est plus importante sur le premier système qui est le seul actif. Le second système entre en activité pour  $\gamma^{(1)} \simeq 0,15$ . On constate que cette activité se traduit sur la courbe  $(\tau, \gamma)$ , figure 4.6, par une augmentation de pente. La pente continue d'augmenter jusqu'à la valeur de  $\gamma^{(1)} \simeq 0,5$  qui correspond à l'arrivée de l'axe de traction sur la zone de symétrie. Pour ce point, les densités de dislocations sont quasiment égales. Une fois cette configuration atteinte, les densités de dislocations restent égales et la pente de la courbe  $(\tau, \gamma)$  décroît (stade III).

### Evolution de l'orientation

L'axe de rotation est initialement l'axe  $[\bar{1}25]$ . Lors de la déformation, il évolue vers l'axe  $[\bar{1}13]$ . Lorsque cet orientation est atteinte, l'axe de traction se déplace sur la zone de symétrie  $[001][\bar{1}11]$  vers  $[\bar{1}12]$ . Il faut noter que l'activité du système conjugué se produit avant l'arrivée de l'axe de traction sur la zone de symétrie. Les points caractéristiques du tableau 4.3 sont repérés sur la figure où est tracée l'évolution de l'axe de traction dans le triangle standard, à partir de sa position initiale (figure 4.9).

### Evolution de la contrainte de traction à l'intérieur de l'éprouvette

**Glissement simple** En glissement simple on constate (figure 4.10) que la contrainte de traction calculée n'est pas homogène à l'intérieur de l'éprouvette. Malgré les mors à double couteaux, il existe une dissymétrie de la contrainte longitudinale qui provoque un couple à l'intérieur de l'éprouvette. Ce couple génère un effort tranchant perpendiculaire à l'axe qui favorise l'activité de systèmes autres que le système primaire et notamment du système secondaire dont l'activité démarre avant l'arrivée de l'axe de traction sur l'axe de symétrie<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Le sens du couple dépend de la valeur de l'angle  $\chi$  entre l'axe de traction et la direction de glissement du système primaire. Trois cas sont à considérer :

- $\chi > \pi/4$ , le couple défavorise le système secondaire,
- $\chi = \pi/4$ , le couple est nul dans l'éprouvette,

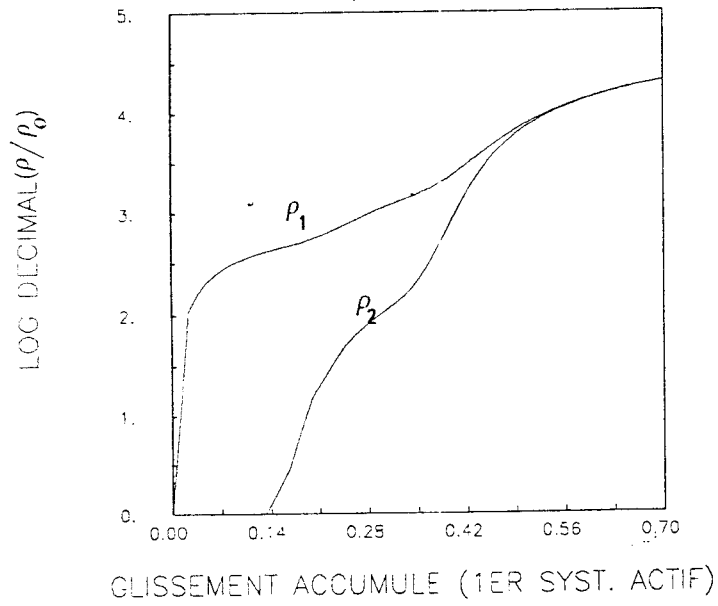


Figure 4.8: Evolution des densités de dislocations primaires et secondaires en fonction de la déformation

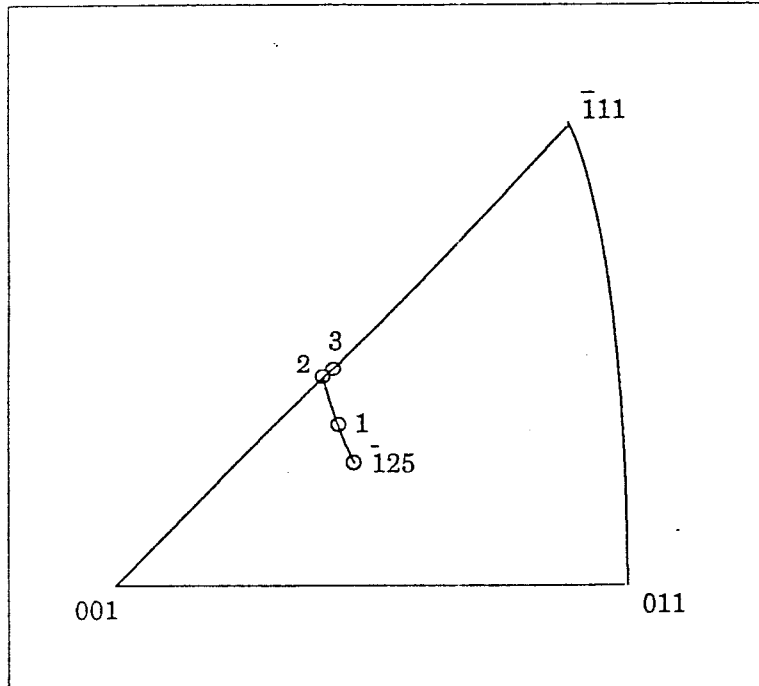


Figure 4.9: Evolution de la rotation pour l'essai dont l'axe de traction a l'orientation initiale  $[125]$

**Glissement double** En glissement double, comme la situation est symétrique, la contrainte longitudinale devient homogène à l'intérieur de l'éprouvette (figure 4.10)

### Forme macroscopique de l'éprouvette, lignes de glissement

Nous sommes capables de visualiser à divers stades de déformation, les lignes de glissement et la forme prise par le maillage (figure 4.11). On note que la simulation montre que près des mors plusieurs systèmes sont nécessaires pour accommoder la déformation.

#### 4.3.4 Conclusions

Ces essais valident l'approche que nous avons eue du comportement du monocristal à travers la loi d'érouissage que nous avons élaborée et la modélisation mécanique adoptée. Ils rendent compte qualitativement du comportement du monocristal (les stades I, II et III sont simulés avec des ordres de grandeurs corrects). Nous avons accès à d'autres informations (évolution des densités de dislocations, évolution de l'orientation, contraintes à l'intérieur de l'éprouvette) durant l'essai, ce qui constitue une aide pour comprendre les phénomènes inhérents à cet essai.

## 4.4 Influence des paramètres de la loi sur les courbes $(\tau, \gamma)$

On souhaite obtenir des informations sur le comportement de la loi en fonction des paramètres suivants :

- la distance d'annihilation  $y_c$ ,
- la variable  $K$  du libre parcours moyen,
- le rapport  $a_F/a_P$ .

On donne dans le tableau 4.4 les différentes valeurs des paramètres pour chaque courbe numérotée. Pour chaque figure on donne les courbes locales (obtenues en extrayant les valeurs en un point d'intégration), les courbes globales en glissement simple (obtenues avec les formules (1.3) et (1.4)) et les courbes obtenues en glissement simple puis double (obtenues avec les formules (1.3) et (1.4) en phase de glissement simple puis les formules (1.5) et (1.6) en phase de glissement double).

### 4.4.1 Description de l'essai utilisé

Pour ces essais, pour lesquels on souhaite obtenir des informations sur l'influence des paramètres de la loi de comportement, on utilise une éprouvette à 16 noeuds et les

- 
- $\chi < \pi/4$ , le couple favorise le système secondaire.

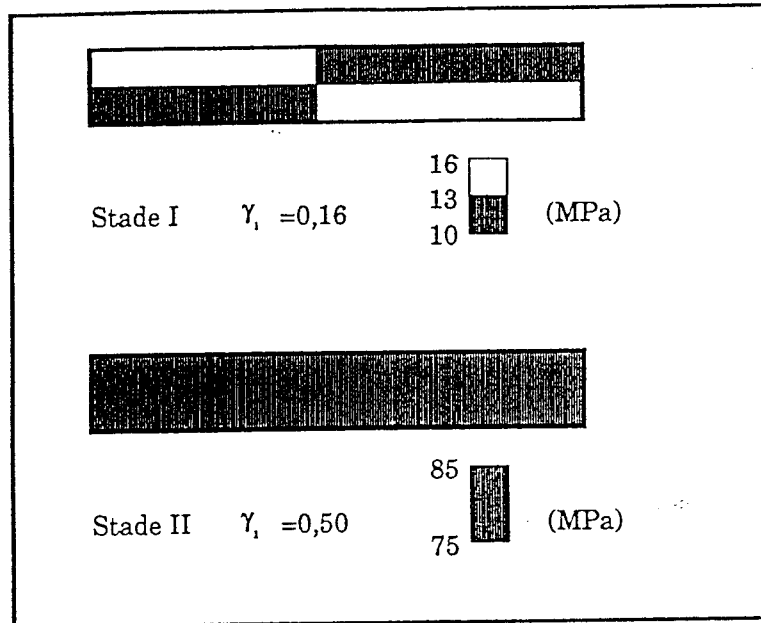


Figure 4.10: Isovaleurs de la contrainte longitudinale à l'intérieur de l'éprouvette en stade I et stade II

$y_C$ (m)	K	$a_P$	$a_F$	Numéro	figure
$5 \times 10^{-10}$	76	0,520	0,520	1	4.13
$8 \times 10^{-10}$	76	0,520	0,520	2	
$9,67 \times 10^{-10}$	76	0,520	0,520	3	
$11 \times 10^{-10}$	76	0,520	0,520	4	
$9,67 \times 10^{-10}$	90	0,520	0,520	1	4.14
$9,67 \times 10^{-10}$	76	0,520	0,520	2	
$9,67 \times 10^{-10}$	50	0,520	0,520	3	
$9,67 \times 10^{-10}$	76	0,520	0,520	1	4.15
$9,67 \times 10^{-10}$	76	0,520	0,620	2	
$9,67 \times 10^{-10}$	76	0,520	0,720	3	

Tableau 4.4: Valeurs des différents jeux de coefficients

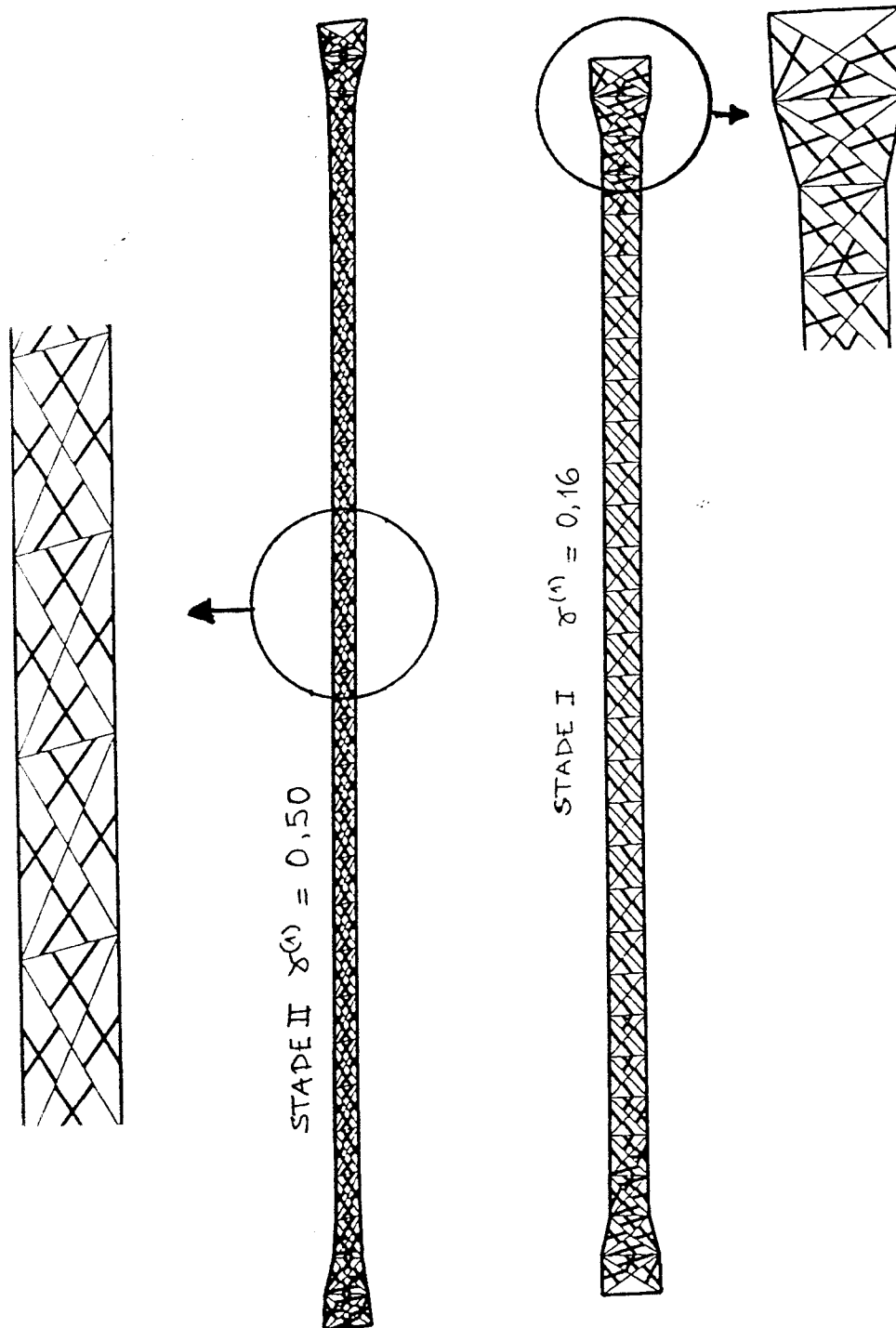


Figure 4.11: Forme de l'éprouvette en stade I et en stade II et aspect des lignes de glissement



conditions aux limites du type vitesse imposée seulement suivant l'axe de traction (voir page 92) Les raisons de ce choix sont :

- économie de temps de calcul sur des essais répétitifs que l'on souhaite seulement comparer,
- diminution de l'effort tranchant dans l'éprouvette qui se traduit par une faible influence des conditions d'essais (géométrie de l'éprouvette, effet des conditions aux limites).

L'orientation est  $[\bar{1}25]$  qui permet d'avoir une phase de glissement simple au début de la déformation (voir table 4.1 et table 4.2, page 96). Sur la figure 4.12, on montre l'allure des courbes  $(\tau, \gamma)$  obtenues avec ces conditions. Sur le même graphique les courbes locale, globale obtenue en glissement simple et globale obtenue en glissement double ont été rassemblées. Pour de telles conditions, les trois stades sont plus marqués que pour l'éprouvette que nous avons présentée page 95.

#### 4.4.2 Influence de la distance d'annihilation

Les résultats sont présentés sur la figure 4.13. Ces résultats montrent que plus  $y_c$  est faible, plus le stade III est retardé. Ce qui est physiquement, un comportement correct, plus la distance d'annihilation est importante, moins la densité de dislocations peut se stabiliser.

#### 4.4.3 Influence de la variable K (taux de production des dislocations)

On constate l'influence directe de la valeur de K sur la pente initiale en stade II. Les résultats sont présentés sur la figure 4.14

#### 4.4.4 Influence de l'anisotropie

Les résultats sont présentés sur la figure 4.15. Le stade I est plus long lorsque l'anisotropie est plus élevée. L'évolution des rotations montre que l'axe de traction ne reste pas sur la zone de stabilité et le traverse en direction de  $[\bar{1}01]$ .

### 4.5 Effet de l'orientation initiale

Pour cette étude, nous avons utilisé l'éprouvette définie page 95. Les courbes  $(\tau, \gamma)$  de trois essais avec des orientations initiales différentes à l'intérieur du triangle standard sont rassemblés. Les deux premiers résultats sont donnés par les deux simulations présentées page 95.

La première orientation est une orientation de glissement double ( $[\bar{1}12]$ ) sans phase de glissement simple.

La seconde est relativement proche de la zone de symétrie  $[001][\bar{1}11]$  (orientation  $[\bar{1}25]$ ). On rappelle que dans ce dernier cas la courbe  $(\tau, \gamma)$  présente les trois stades habituellement observés.

La troisième simulation est effectuée sur une éprouvette avec un axe de traction  $[\bar{1}34]$  assez éloigné de la zone de symétrie  $[001][\bar{1}11]$ . Dans ce dernier cas, le stade I est très allongé et la pente du stade II plus faible que pour l'orientation  $[\bar{1}25]$ . Les orientations initiales de chaque éprouvette sont données dans le tableau 4.5 et les courbes obtenues pour un élément au centre de l'éprouvette sont présentées figure 4.16. Ces courbes sont comparables aux courbes expérimentales de Franciosi [Fra84] (voir figure 4.17).

## 4.6 Influence des conditions aux limites

Une simulation a été faite sur l'éprouvette définie page 95 avec l'orientation  $[\bar{1}25]$  en utilisant les conditions de type mors fixes à chaque extrémité. Cette simulation peut être comparée à la simulation dans les mêmes conditions avec des mors à double couteaux. Les courbes  $(\tau, \gamma)$  pour les deux types de conditions aux limites sont données figure 4.18. On constate que les courbes sont confondues, ce qui montre pour la géométrie de l'éprouvette considérée que les influences des conditions aux limites ont une influence négligeable sur les résultats lorsque l'éprouvette a une grande longueur relativement à ses directions transversales.

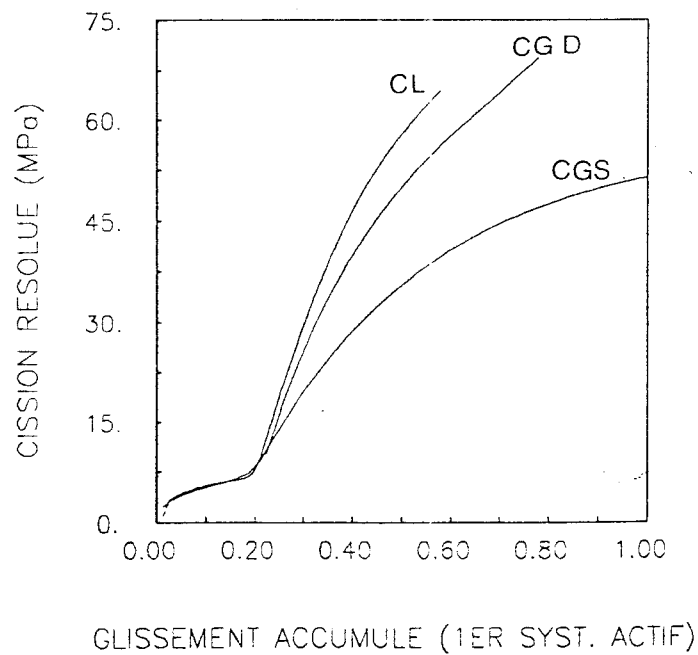


Figure 4.12: Courbes  $(\tau, \gamma)$  obtenues avec la loi de comportement isotrope et les conditions aux limites de type III

$x_1$	$x_2$	$x_3$	Numéro
[112]	[110]	[111]	1
[125]	[210]	[121]	2
[134]	[752]	[111]	3

Tableau 4.5: Orientations initiales pour les différentes simulations

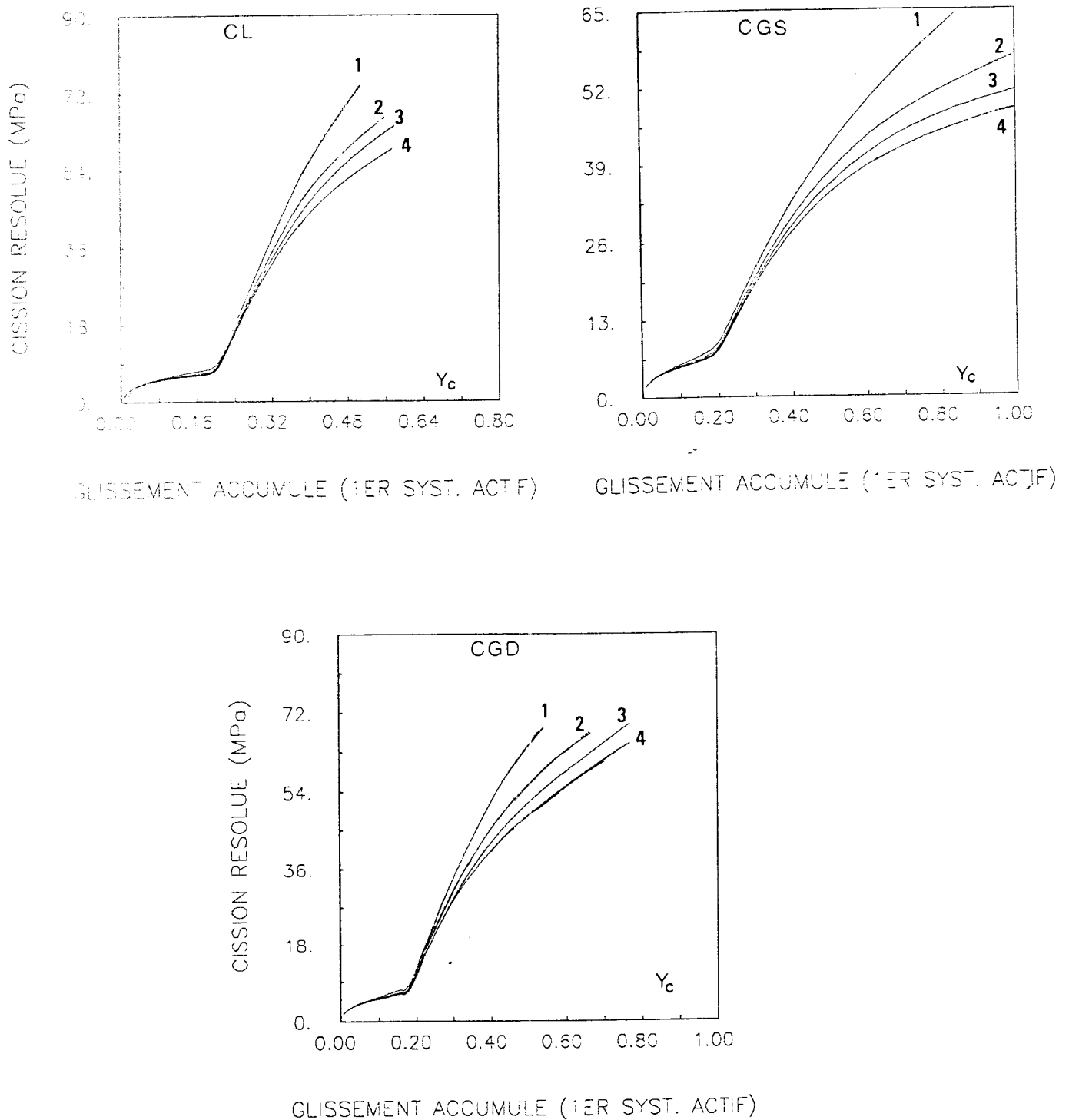


Figure 4.13: Influence de la distance d'annihilation sur les courbes  $(\tau, \gamma)$  à trois stades

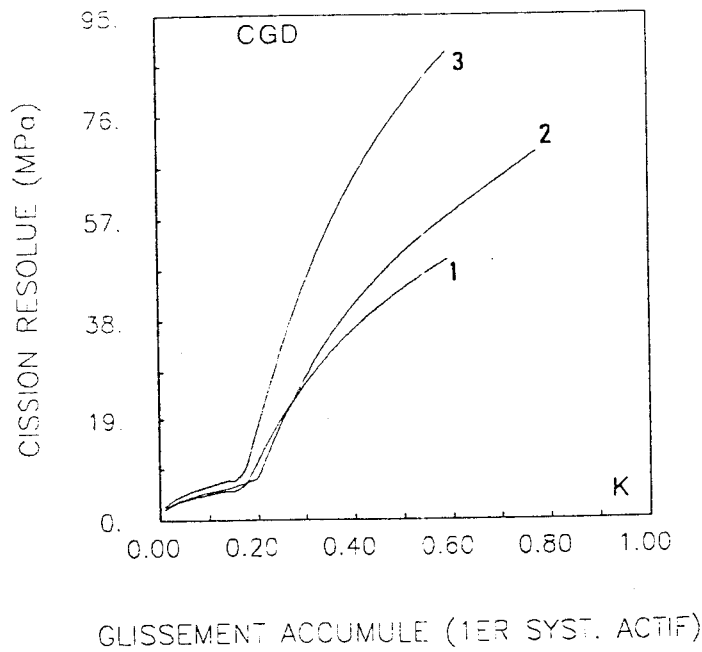
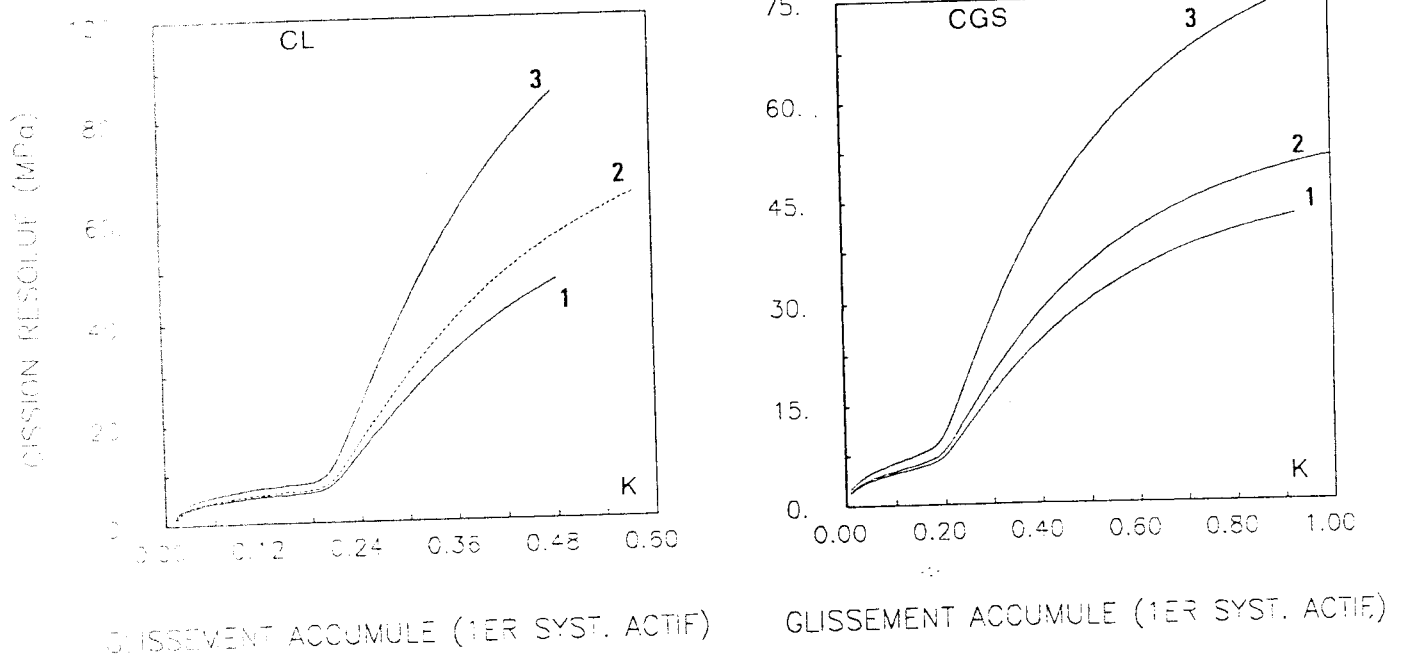
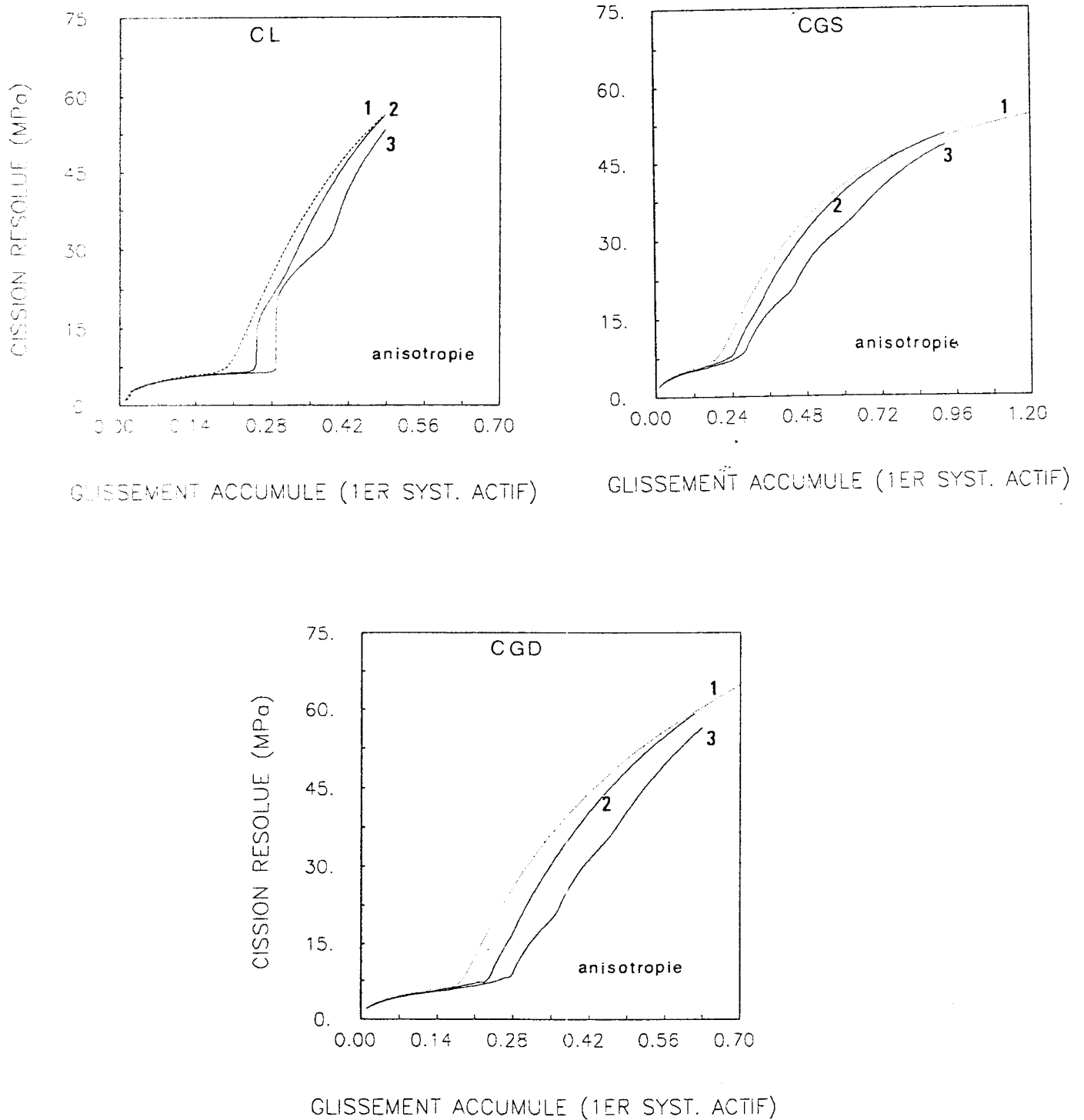


Figure 4.14: Influence de la variable K

Figure 4.15: Influence de l'anisotropie sur les courbes  $(\tau, \gamma)$  à trois stades

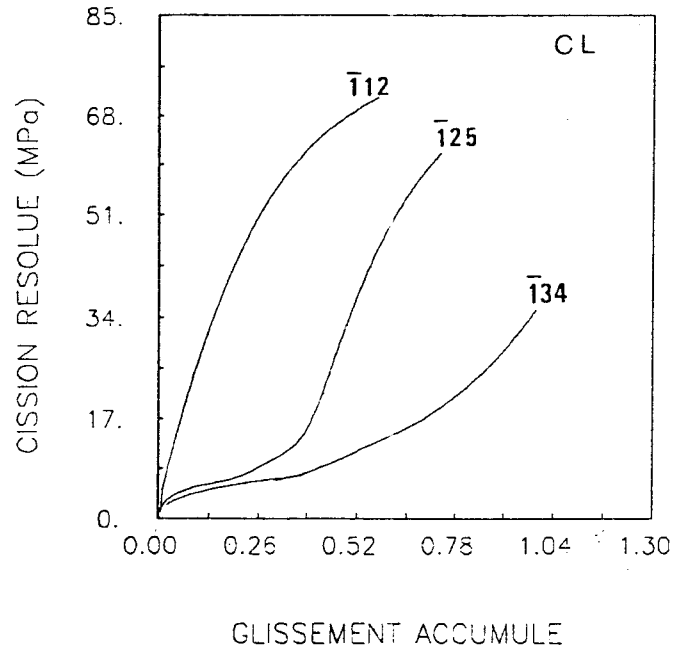


Figure 4.16: Influence de l'orientation initiale sur les courbes  $(\tau, \gamma)$

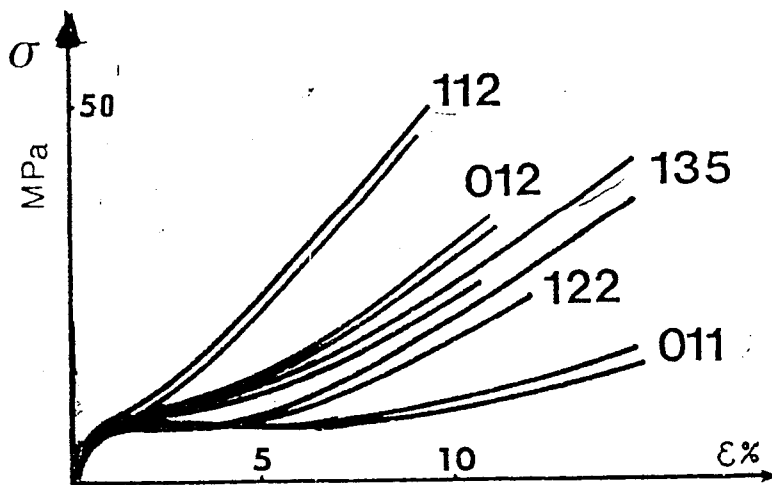


Figure 4.17: Courbes de traction pour des essais de traction sur du cuivre [Fra84]

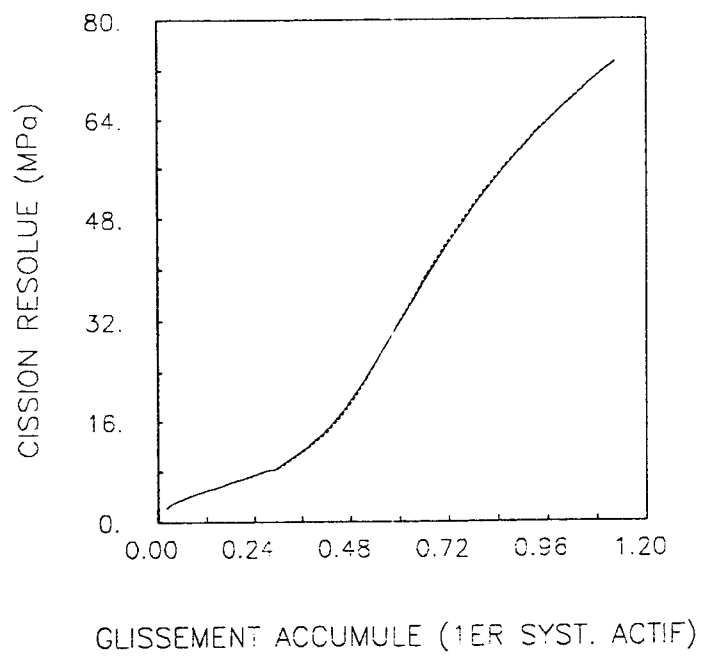


Figure 4.18: Influence des conditions aux limites sur la courbe  $(\tau, \gamma)$  d'un essai dont l'axe de traction a l'orientation initiale  $[125]$ .



# Conclusions et perspectives

## 4.7 Conclusions

Dans ce travail, nous avons atteint l'objectif présenté au début de ce rapport qui est, d'une part, la réalisation d'un code éléments finis capable de simuler le comportement de monocristaux ou d'agrégats cristallins métalliques à structure cubiques, d'autre part, la formulation d'une loi de comportement du monocristal monophasé représentant correctement les phénomènes complexes se produisant lors de la déformation.

Le code de simulation réalisé est fondé sur une description mécanique rigoureuse des déformations du monocristal. La déformation par glissement de dislocations qui impose l'utilisation de lois d'écoulement très fortement non-linéaires et des conditions aux limites spéciales (type mors à double couteaux pour la traction par exemple) a nécessité le développement d'algorithmes spéciaux. Le code, de nature très modulaire, permet l'intégration de différentes lois de comportement et constitue un outil pour les tester.

La formulation de la loi de comportement est relativement simple mais cependant, la plupart des aspects physiques intervenant dans la déformation du monocristal y sont inclus :

- nature cristallographique du glissement,
- interaction entre dislocations de différents systèmes,
- génération et annihilation de dislocations,
- libre parcours moyen de chaque système de glissement,
- seuil d'écoulement au voisinage duquel les vitesses de glissement des dislocations sont significatives,
- viscosité du matériau.

Il est facile d'obtenir des valeurs pour les coefficients intervenant dans cette loi si on considère que le matériau est isotrope. Un jeu de coefficients est proposé pour du cuivre pur considéré isotrope. L'isotropie (écrouissage identique sur chaque système au cours de la déformation) est définie à partir de considération de stabilité en traction uniaxiale monotone. Une analyse a montré qu'une stabilisation de l'axe de

traction sur une zone stable géométriquement ne peut être obtenue que si l'écroutissage sur le système actif et l'écroutissage des systèmes latents ont la même valeur.

Cependant pour des matériaux au comportement "stable" en traction uniaxiale monotone, notamment à faibles taux de prédéformation, des rapports de durcissement latent importants (parfois 3 à 4) ont été mesurés par certains auteurs au moyen d'essais de durcissement latent.

Cette étude remet en cause la transposition que l'on fait habituellement des résultats obtenus avec des essais de durcissement latent (chargement discontinu) à l'analyse de l'essai de traction (chargement monotone). Les essais de durcissement latent présentent des effets transitoires inhérents à la nature discontinue de l'essai qui ne se produisent pas en traction monotone. La loi que nous avons développée ne permet pas, à priori, de simuler de telles transitions.

Les résultats de simulations de l'essai de traction sur le cuivre sont en bon accord qualitatif avec les résultats expérimentaux et prouvent que la loi de comportement proposée est adaptée à la description du comportement plastique du monocristal en chemin monotone.

D'une manière générale ce travail insiste sur la complexité du comportement des monocristaux soumis à des déformations et notamment met en évidence que de nombreux paramètres sont à considérer pour l'analyse d'un essai de traction uniaxiale (géométrie de l'éprouvette, conditions aux limites, nature du matériau, choix judicieux des formules de calcul pour l'obtention des courbes  $(\tau, \gamma)$ ...). A cause du nombre de ces paramètres et de leur influence sur le résultat de l'essai, il est impossible d'avoir une représentation exacte du comportement du matériau à partir d'essais de traction uniaxiale l'intérieur du triangle standard.

Ce travail démontre que le comportement complexe plastique des monocristaux monophasés peut être simulé par un modèle simple. L'introduction des aspects microstructuraux via les mécanismes physiques qui se produisent lors de la déformation évite d'avoir recours à de nombreux paramètres. Dans le cas d'une déformation monotone, il suffit de considérer l'évolution des densités de dislocations totales accumulées sur chaque système. La simulation d'autres essais tels les essais de durcissement latent nécessitera vraisemblablement quelques raffinements de la loi présentée.

## 4.8 Perspectives

Le code de simulation est au point et les paramètres d'utilisation sont ajustés. Des résultats expérimentaux sont retrouvés en utilisant la forme de la loi de comportement que nous avons identifiée. Le travail peut être poursuivi dans plusieurs domaines.

La loi proposée est identifiée pour le cuivre pur pour lequel (et pour les autres matériaux à structures cubiques à faces centrées), d'une part, les mécanismes impli-

qués lors de la déformations sont connus, d'autre part, les données dans la littérature sont abondantes.

Les données sont beaucoup moins nombreuses dans le cas des métaux à structures cubiques et notamment pour le fer et ses alliages. Il apparaît nécessaire d'avoir une forme de la loi de comportement adaptée aux particularités du fer. Les coefficients devront être identifiés en considérant l'anisotropie (au sens où nous l'avons définie) du fer. Cette loi de comportement sera validée grâce à la simulation numérique d'expériences judicieusement choisies.

D'autres simulations de l'essai de traction en faisant varier systématiquement certains paramètres sont envisageables. Les données accessibles grâce au code permettront de déterminer les effets inhérents à cet essai lorsqu'on cherche à caractériser le comportement d'un matériau monocristallin.

La simulation d'autres expériences, telles que la compression plane ou le cisaillement de monocristaux, sera intéressante pour l'interprétation de tels essais<sup>4</sup>.

La simulation d'essais sur bicristaux ou des tricristaux apportera un complément d'informations utiles pour comprendre le rôle joué par les joints de grains et pour analyser les phénomènes qui se produisent à leur voisinage.<sup>5</sup>

---

<sup>4</sup>Une étude du comportement du fer monocristallin sous cisaillement est à l'étude dans le laboratoire GPM2 où ce travail de thèse a été réalisé

<sup>5</sup>Cette étude est déjà entreprise au laboratoire PMTM de Villetaneuse (Paris-Nord) où des simulations sur des tricristaux et des multicristaux de cuivre sont effectuées grâce à une version du code [TRT91]

# Références bibliographiques

- [AGVH87] E. Aernoudt, J. Gil-Sevilano, and P. Van Houtte. Structural background of yield and flow. Dans *The 8th Riso Symposium on Metallurgy and Material Science*, page 1, 1987.
- [BC91] H. Burlet and G. Cailletaud. Zebulon, a finite element code for non-linear material behavior. Dans *European Conference on new advances in computational structural mechanics*, 1991.
- [BCT67] D.K. Bowen, J.W. Christian, and Taylor. Deformation properties of niobium single crystals. *Can. J. Phys.*, 45:903, 1967.
- [BG67] J.F. Bell and R.B. Green. An experimental study of the double slip deformation hypothesis for face-centered cubic single crystals. *Phil. Mag.*, 15:469, 1967.
- [BJ65] K.D. Bowen and Christian J.W. The calculation of shear stress and shear strain for double glide in tension and compression. *Phil. Mag.*, 12:369, 1965.
- [Bou90] J.A.M. Boukadia. *Contribution à l'étude de la viscoplasticité anisotrope en grandes transformations*. Thèse, Ecole Centrale de Lyon, 1990.
- [BS87] J.A.M. Boukadia and F. Sidoroff. Simple shear and torsion of a perfectly plastic single crystal in finite transformation. Dans *Symposium franco-polonais*, 1987.
- [BZ76] S.J. Basinski and Basinski Z.S. Plastic deformation and work hardening. Dans F.R.N. Nabarro, editor, *Dislocations in solids*, North Holland Publishing Company, 1976.
- [CAS1] Y.W. Chang and R.J. Asaro. An experimental study of shear localization in aluminum-copper single crystals. *Acta Metallurgica*, 29:241, 1981.
- [Cai87] M. Cailletaud. *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. Thèse, Université P. et M. Curie, Paris VI, 1987.

- [CNP88] G. Cailletaud, P. Nouailhas, and Poubanne. Modelling of viscoplastic anisotropic behavior of single crystals. Dans *Proceedings of Mecamat, International Seminar on the Inelastic Behavior of Solids : Models and Utilisation*, Besançon, France, 1988.
- [DB60] J. Diehl and R. Berner. Temperaturabhängigkeit der Verfestigung von Kupfer-Einkristallen oberhalb 78 K. *Z. Metall.*, 51:4, 1960.
- [DF69] M.S. Duesbery and R.A. Foxall. A detailed study of the deformation of high purity niobium single crystals. *Phil.Mag.*, 719, 1969.
- [DSW83] J.H. Driver, A. Skalli, and M. Wintemberger. Etude théorique et expérimentale de la déformation plastique de monocristaux d'aluminium. *Mémoires et Etudes Scientifiques Revue de Métallurgie*, 141, 1983.
- [EM79] U. Essmann and H. Mughrabi. Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformations and limits of dislocation densities. *Phil. Mag.*, A40:731, 1979.
- [EM84] Y. Estrin and H. Mecking. A unified phenomenological description of work-hardening and creep based on one parameter models. *Acta Metallurgica*, 57, 1984.
- [Esc66] B Escaig. Sur l'origine de la limite élastique des métaux cubiques centrés à basses températures. *J. Phys.*, 27:C3-205, 1966.
- [FR50] F.C. Franck and W.T. Read. *Phys. Rev.*, 79:722, 1950.
- [Fra84] P. Franciosi. *Etude théorique et expérimentale du comportement élasto-plastique des monocristaux se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi-statique*. Thèse, Paris Nord, 1984.
- [Fra85] P. Franciosi. The concept of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metallurgica*, 33:1601, 1985.
- [Fra87] P. Franciosi. On work hardening relations for constitutive models. Dans *The 8th Riso Symposium on Metallurgy and Material Science*, page 83, 1987.
- [Fri64] J. Friedel. *Dislocations*. Pergamon Press, 1964.
- [GD67] P. Guyot and J.E. Dorn. A critical review of Peierls mechanism. *Can. J. Phys.*, 45:983, 1967.
- [Gro79] P. Groh. Dislocations et déformation plastique. Dans *Ecole d'été d'Yrvals*, page 67, 1979.
- [GS55] Von Goler and G. Sachs. *Z. Phys.*, 55:581, 1955.

- [Hir68] P.B. Hirsch. Some aspects of the deformation of body centered cubic metals. *ICSMA* 2, 9:30, 1968.
- [HKTL90] F. Havlicek, J. Kratochvil, M. Tokuda, and V. Lev. Finite element model of plastically deformed multicrystals. *International Journal of Plasticity*, 6:281, 1990.
- [HL68] J.P. Hirth and J. Lothe. *Theory of dislocations*. Mac Graham Mill Book Company New York, 1968.
- [Hon84] R.W.K. Honeycombe. *The plastic deformation of metals*. Edwards Arnold, 1984.
- [Jao65] B. Jaoul. *Etude de la plasticité et application aux métaux*. Dunod, 1965.
- [JB76] P.J. Jackson and Z.S. Basinski. Latent hardening and the flow stress in copper single crystals. *Can. J. Phys.*, 45:707, 1976.
- [KCJ83] U.F. Kocks, G.R. Canova, and J.J. JONAS. Yields vectors in fcc crystals. *Acta Metallurgica*, 31:1243, 1983.
- [KN67] A.S. Keh and Y. Nakada. Plasticity of iron single crystals. *Can. J. Phys.*, 45:1101, 1967.
- [Koc66] U.F. Kocks. *Phil. Mag.*, 13:541, 1966.
- [Koc76] U.F. Kocks. Laws for work-hardening and low temperature creep. *ASME, J. Eng. Mater. Technol.*, 98:76, 1976.
- [KV67] F. Kroupa and V. Vitek. Slip and the conception of splitting dislocations in bcc metals. *Can. J. Phys.*, 45:945, 1967.
- [LS83] S. Libovicky and B. Sestak. Development of the dislocation arrangement in Fe-0.9 wt% Si single crystals deformed in tension. *Phil. Mag. (A)*, 47:1, 1983.
- [Mal69] L.E. Malvern. *Introduction to the mechanics of a continuous medium*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1969.
- [Man65] J. Mandel. Généralisation de la plasticité de W.T. Koiter. *Int. J. Eng. Solids Struct.*, 1:273, 1965.
- [MC82] J.P. Michel and G. Champier. Influence of predeformation upon the mechanical properties of single crystal : latent hardening and work softening. *Single crystals properties*, B2:21, 1982.
- [MC91a] L. Méric and G. Cailletaud. Finite element implementation of a model for single crystals at finite strain. Dans *European Conference on New Advances in Computational Structural Mechanics*, 1991.

- [MC91b] L. Méric and G. Cailletaud. Single crystal modelling for structural calculations. Part 2 : finite element implementation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113:171, 1991.
- [MF87] H. Mecking and Y Estrin. Microstructure related constitutive modelling of plastic deformation. Dans *The 8th Riso Symposium on Metallurgy and Material Science*, page 123, 1987.
- [MFU77] H. Miyaoto, K. Funami, and M. Uchara. Latent hardening in aluminium single crystals. *J. Fac. Engng. Univ. Tok. (B)*, 24:349, 1977.
- [MK81] H. Mecking and U.F. Kocks. Kinetics of flow and strain hardening. *Acta Metallurgica*, 29:1865, 1981.
- [MOS89] B. Moran, M. Ortiz, and C.F. Shih. Formulation of implicit finite element methods for multiplicative finite deformation plasticity. *Int. J. Num. Met. Engg.*, 29:483, 1989.
- [MOS90] R. Mohan, M. Ortiz, and C.F. Shih. An analysis of cracks in ductile single crystals subjected to anti-plane shear. *to be published*, 1990.
- [MOS91] R. Mohan, M. Ortizz, and C.F. Shih. Numerical studies of craks in single crystals subjected to mode I loading. *To be published*, 1991.
- [MS65] T.E. Mitchell and W.A. Spitzig. Three stage hardening in tantalum single crystals. *Acta Metallurgica*, 1169, 1965.
- [NALP85] A. Needleman, J. Asaro, J. Lemonds, and D. Peirce. Finite element analysis of crystalline solids. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, 52:689, 1985.
- [ND67] F.R.N. Nabarro and T.R. Duncan. Dissociated dislocations and the Schmid law of resolved shear stress in bcc metals. *Can. J. Phys.*, 45:939, 1967.
- [NK66] Y. Nakada and A.S. Keh. Latent hardening in iron single crystals. *Acta Metallurgica*, 14:961, 1966.
- [Oha86] T. Ohashi. Analyses of local elastic stress in the vicinity of grain boundary junctions. Dans *Proceedings of the JIMIS-4*, 1986.
- [Oha87] T. Ohashi. Computer simulation of non-uniform multiple slip in face centered cubic crystals. *Transaction of the Japan Institute of Metals*, 28:906, 1987.
- [Orl89] B. Orleans-Joliett. *Déformation plastique de monocristaux de structure cubique centrée en compression plane*. Thèse, Ecole Supérieure des Mines de Saint Etienne (France), 1989.

- [Oro34] E. Orowan. *Z. Phys.*, 89:634, 1934.
- [PAN82] D. Peirce, R.J. Asaro, and A. Needleman. An analysis of non uniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metallurgica*, 30:1087, 1982.
- [PAN83] D. Peirce, J. Asaro, and A. Needleman. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metallurgica*, 31:1951, 1983.
- [Phi79] J. Philibert. Dislocations et déformation plastique. Dans *Ecole d'été d'Yrivals*, page 101, 1979.
- [Pol34] M. Polanyi. *Z. Phys.*, 98:660, 1934.
- [PSN84] D. Peirce, C.F. Shih, and A. Needleman. A tangent modulus method for rate dependent solids. *Computer and Structures*, 18:875, 1984.
- [RHB90] E.F. Rauch, S. Hashimoto, and B. Baudalet. Simple shear deformation of iron-silicon single crystals. *Scripta Metallurgica*, 24:1081, 1990.
- [Roc76] C. Roche. *Etude de la déformation plastique par cisaillement de monocristaux d'alliage fer-silicium*. Thèse, Université Paris VI, 1976.
- [RW87] M. Renouart and M. Wintemberger. *C. R. Acad. Sci. Paris B283,237*. 1987.
- [SK70a] W.A. Spitzig and A.S. Keh. The effect of orientation and temperature on plastic flow properties of iron single crystals. *Acta Metallurgica*, 18:64, 1970.
- [SK70b] W.A. Spitzig and A.S. Keh. Orientation and temperature dependence of slip in iron single crystals. *Met. Trans.*, 1:70, 1970.
- [SS71] B. Sestak and A. Seeger. The relationship between the work hardening of bcc and fcc metals. *phy. stat. sol. (b)*, 43:433, 1971.
- [Tak69] T. Takeuchi. Orientation dependence of work hardening in iron single crystals. *Jap. J. Appl. Phys.*, 8:30, 1969.
- [Tay34] G.I. Taylor. *Proc. Roy. Soc.*, A145:362, 1934.
- [Teo70] C. Teodosiu. A dynamic theory of dislocations and its applications to the theory of elastic-plastic continuum. Dans J.A. Simons, R. deWit, and 1969) Bullough, R. (Washington, editors, *Fundamental aspects of dislocation theory*, page 837, NBS Spec. Publ. 317 Vol. 2, 1970.