

Polytech'Savoie

THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Savoie

Spécialité : *Mécanique et Matériaux*

préparée au laboratoire SYstèmes et Matériaux pour la MEcatronique (SYMME)

présentée et soutenue publiquement

par

Ciprian MANOLE

le 4 Mars 2010

ANALYSE DES CONTRAINTES INTERNES DANS LES MONOCRISTAUX CFC : VERS UNE NOUVELLE LOI DE PLASTICITE CRISTALLINE.

Directeurs de thèse :

Christophe DÉPRÉS et Laurent TABOUROT

Jury

M. Yves BRECHET	Président	INP Grenoble
M. Marc FIVEL	Rapporteur	INP Grenoble
M. Halim HADDADI	Rapporteur	Université Paris 13
M. Arnaud FAZEKAS	Examinateur	INSA Lyon
M. Christophe DÉPRÉS	Directeur de thèse	Université de Savoie
M. Laurent TABOUROT	Co-Directeur de thèse	Université de Savoie

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier tout d'abord mes encadrants **Christophe DEPRES** et **Laurent TABOUROT** respectivement directeur et co-directeur de thèse, pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire SYMME. Je tiens ainsi à leur exprimer toute ma reconnaissance pour ces trois (presque demi) années de thèse que j'ai passées à leurs côtés. Au cours de ces années, leur grande disponibilité, leur rigueur scientifique, leur enthousiasme et leur précieux conseils m'ont permis de travailler dans les meilleures conditions. La confiance qu'ils m'ont accordée ainsi que nos nombreuses discussions m'ont permis de progresser, de devenir plus autonome et de mieux appréhender les différents aspects du travail scientifique ainsi que d'améliorer mes compétences à la fois dans le domaine expérimental et de la simulation numérique.

J'adresse particulièrement mes sincères remerciements à **Christophe DEPRES** pour sa disponibilité et pour ses précieux conseils qui m'ont guidé au cours de mes travaux de recherche. Je tiens également à lui remercier pour son implication dans ce travail de thèse notamment dans la partie de rédaction et pour tout son soutien en général, même dans les moments les moins faciles, me permettant ainsi de mener à bien ces travaux de recherche aux résultats très prometteurs.

J'exprime aussi ma reconnaissance aux membres du jury Messieurs **Yves BRECHET**, **Marc FIVEL, Halim HADDADI** et **Arnaud FAZEKAS** pour l'honneur qu'ils m'ont fait en évaluant ce travail. Je les remercie ainsi pour leurs remarques et leurs conseils qui ont permis l'amélioration de ce manuscrit.

Un grand merci aussi à **Jean Christophe** et **Blaise** pour leur aide technique à la mise en place des essais expérimentaux, ainsi qu'à tous mes collègues avec lesquels j'ai eu de riches échanges scientifiques et pour les bons moments passés ensemble en dehors du laboratoire.

Mes remerciements vont aussi aux membres de ma famille qui ont été à mes cotés pendant tout ce temps. Leur vrai intérêt à l'égard de mon travail m'a grandement aidé à prendre du recul sur le sujet de la thèse tout simplement par les diverses questions qu'ils m'ont posé. Ainsi, je tiens également à les remercier pour leur soutien lors de ma soutenance publique.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION **7**

CHAPITRE 1 - DESCRIPTION DES CONTRAINTES DANS UNE MICROSTRUCTURE DE DISLOCATIONS

1 INTRODUCTION **13**

2 DESCRIPTION DE L'OUTIL NUMERIQUE UTILISE **15**

2.1 PRINCIPE DU FONCTIONNEMENT DU CODE DDD 15

2.2 LIMITATIONS DE LA MODELISATION DDD 18

2.3 CONCLUSION 19

3 ANALYSE QUALITATIVE D'UNE MICROSTRUCTURE **20**

3.1 DESCRIPTION DE L'ESSAI NUMERIQUE REALISE 20

3.2 ANALYSE DE L'EVOLUTION DES GRANDEURS MECANIQUES 22

3.3 ANALYSE DESCRIPTIVE DE LA MICROSTRUCTURE 24

3.4 PASSAGE DU GRAIN DDD AU MONOCRISTAL 26

3.5 CONCLUSION 29

4 DESCRIPTION GLOBALE DE L'ETAT DE LA MICROSTRUCTURE **29**

4.1 EVOLUTION DE LA DENSITE DE DISLOCATION 30

4.2 INSUFFISANCE DE LA DENSITE DE DISLOCATIONS : VERS UNE DESCRIPTION LOCALE DE LA MICROSTRUCTURE 34

4.3 EVOLUTION DES STRUCTURE DIPOLAIRES EN GLISSEMENT SIMPLE 35

4.4 CONCLUSION 38

5 DESCRIPTION LOCALE DE L'ETAT DE CONTRAINTE DANS LA MICROSTRUCTURE **38**

5.1 DEFINITION DES CONTRAINTES A *COURTE* ET A *LONGUE* DISTANCE 39

5.2 REPARTITION DES CONTRAINTES A COURTE DISTANCE 42

5.3 REPARTITION DES CONTRAINTES A LONGUE DISTANCE 48

5.4 DISCUSSION 54

6 CONCLUSION **55**

CHAPITRE 2 - DEVELOPPEMENT D'UN MODELE DE PLASTICITE CRISTALLINE

1 INTRODUCTION **59**

2 MODELE PHYSIQUE EN GLISSEMENT SIMPLE **59**

2.1 DESCRIPTION DE LA MICROSTRUCTURE DE DISLOCATIONS : VARIABLES D'ETAT 59

2.2 LOI D'ECOULEMENT 61

2.3 LOI D'ETAT DETERMINANT LES CONTRAINTES A LONGUE DISTANCE 61

2.4 BILAN ENERGETIQUE 62

2.5 LOI DE PRODUCTION DE DISLOCATIONS 64

2.6 BILAN DES EQUATIONS 66
2.7 DISCUSSION 66
2.7.1 A propos de l'extrapolation des résultats DDD 66
2.7.2 A propos de la taille du VER 69
2.7.3 A propos de la gestion des variables d'état 69

3 ANALYSE DU COMPORTEMENT CYCLIQUE EN GLISSEMENT SIMPLE D'UN VER DE CRISTAL CFC 70

3.1 EVOLUTION DU COMPORTEMENT MECANIQUE 70
3.2 EVOLUTION DES VARIABLES INTERNES 72
3.3 BILAN ENERGETIQUE 74
3.4 DISCUSSION 76

4 EXTENSION DU MODELE AU GLISSEMENT MULTIPLE 77

4.1 VARIABLES D'ETAT 77
4.2 REECRITURE DES EQUATIONS 78
4.3 REMARQUES 78

5 CONCLUSION 80

6 ANNEXES 81

6.1 ANNEXE 1- LOI D'ECOULEMENT LOCALE 81
6.2 ANNEXE 2 - LOI D'ETAT PILOTANT LA CONTRAINTE A LONGUE DISTANCE 82

CHAPITRE 3 - ANALYSE DES PERFORMANCES DU MODELE PHYSIQUE

1 INTRODUCTION 85

2 SIMULATION DES CHARGEMENTS CYCLIQUES 85

2.1 PREPARATION DES SIMULATIONS 85
2.2 ALLURE GENERALE DES CYCLES 86
2.3 ANALYSE DE L'ECROUISSAGE CYCLIQUE 87
2.4 ANALYSE DE L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE 90
2.5 INFLUENCE DE LA DISTRIBUTION $F_p(s)$ SUR L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE 91
2.6 INFLUENCE DU PARAMETRE M_p SUR L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE 94
2.7 CONCLUSION 95

3 SIMULATION DES CHARGEMENTS MONOTONES 96

4 CONCLUSION 98

SYNTHESE ET PERSPECTIVES 99

BIBLIOGRAPHIE 103

INTRODUCTION

Depuis une vingtaine d'années, on assiste au développement d'une multitude de modèles dit de plasticité cristalline. Les motivations pour développer de tels modèles qui reposent sur une connaissance fine des mécanismes physiques à l'origine de la plasticité sont multiples.

Les modèles macroscopiques sont notoirement phénoménologiques et de cette caractéristique découle des limitations sur leur domaine d'application. Ils doivent être utilisés avec précautions en limitant leur emploi à un domaine d'application pour lequel les sollicitations imposées restent proches des conditions de l'expérience. L'extension du domaine d'application requiert l'ajout de paramètres supplémentaires et rend l'identification lourde et coûteuse pour un bénéfice en matière de performance relativement discutable.

L'idée de développer des modèles physiquement fondés répond notamment à cet enjeu : il s'agit d'obtenir des modélisations robustes à large spectre d'application pour un nombre limité de paramètres. A cette fin, ils requièrent un jeu des variables d'état pertinent pour décrire le système. Comme les dislocations sont le support de la déformation plastique, leur densité – qui est bien un paramètre d'état du système – est le premier paramètre incontournable de ce type de modèle. Les modélisations physiques ont toutefois un essor moins important que celui auquel on pouvait s'attendre pour différentes raisons. Les descriptions actuelles du comportement sont proposées au niveau d'un grain (ou du monocristal), ce qui rend impossible la simulation d'une pièce industrielle comportant plusieurs millions de grains. Par ailleurs, même si les promoteurs de ces modèles revendiquent un caractère physique de leur représentation, il n'en reste pas moins qu'une bonne partie de ces modèles recourent à des artefacts phénoménologiques pour rendre compte d'effets pas encore très bien compris au niveau physique.

C'est particulièrement le cas lorsqu'il s'agit de décrire l'écrouissage cinématique qui se manifeste lors de trajets de chargement alternés. L'ensemble des modèles existantes bute sur cet écueil et ne s'en tire qu'au prix d'une modélisation phénoménologique qui bien que formulée sur un système de glissement est très peu inspirée par la physique.

La raison est sans doute qu'il n'existe pas de représentation claire de l'origine de l'écrouissage cinématique sur laquelle fonder un modèle physique. Cependant, en explorant la littérature, on s'aperçoit que l'origine de l'écrouissage cinématique repose sans doute sur un effet des microstructures de dislocations qui s'établissent au cours de la déformation. Néanmoins, aucune règle généralisable à l'échelle d'un modèle n'est proposée. On comprend ainsi mieux la faiblesse constitutionnelle des modèles actuels qui n'utilisent que la densité de dislocations comme variable de description globale de la microstructure, faute de pouvoir assoir la modélisation sur des phénomènes bien compris.

La situation actuelle n'est donc pas transcendante. Les performances des modèles physiques stagnent et le lien entre les propriétés à l'échelle locale et le comportement macroscopique est obtenu en recourant à

des techniques lourdes d'homogénéisation ou de calcul éléments finis bornant *in fine* l'application à des cas portant sur des agrégats composés d'au plus quelques milliers de grains.

Une autre voie, qui consiste à inférer le comportement global en dégageant des lois de comportement collectif synthétisant la multitude de phénomènes microstructuraux, paraît essentielle pour parvenir à une modélisation exploitable à un niveau supérieur. Elle n'est, quant à elle, que peu ou pas du tout adoptée par la communauté scientifique.

Cette thèse a donc un double objectif.

Le *premier*, c'est de proposer une analyse exhaustive des microstructures se développant dans le matériau au cours d'un chargement cyclique. Il s'agit également de déterminer l'état de contrainte associé à la microstructure dans la mesure où les dislocations stockées dans un monocristal sont sans aucun doute les vecteurs de stockage de l'énergie élastique. C'est cette énergie accumulée qui contribue lors d'un retour à la diminution de l'effort de chargement (effet Bauschinger). De cette analyse, il est attendu deux résultats. Le premier consiste à proposer le (ou les) paramètre(s) d'état pertinent(s) de la microstructure. Le second est relatif à la transition d'échelles. Il s'agit d'être en mesure de déterminer une loi collective valable à l'échelle du volume étudié traduisant la statistique du mouvement d'ensemble d'une multitude d'éléments subissant eux-mêmes une multitude de phénomènes aux règles d'évolution précises mais définies localement.

Le *second* objectif de ce travail relève de la modélisation. Sur la base d'une représentation qu'on espère améliorée de la physique de la déformation, il s'agit de déterminer la (ou les) lois de comportement qui relie(nt) les évolutions des paramètres d'état au comportement global du matériau en l'occurrence ici d'un VER d'une taille supérieure à la microstructure. Pour illustrer cette tâche, il s'agit à l'instar des gaz de donner une relation d'état (PV=nRT) entre les variables d'état globales (P, V, et T) sur le système global (le gaz) alors qu'il est composé d'une multitude de particules (les atomes de gaz) soumis a des lois élémentaires relativement complexes (dynamique, interaction…). Ce travail doit découler naturellement du travail d'analyse du premier volet de la thèse.

De cette analyse découle logiquement l'organisation de ce rapport.

Dans le **premier chapitre**, il s'agit d'analyser les caractéristiques des microstructures qui se développent au cours de la déformation. La plupart du temps ces analyses sont effectuées en trajet monotone. Les phénomènes qu'il s'agit ici d'étudier sont directement liés au changement de trajet de chargement. Il est donc proposé d'effectuer ce travail sur une microstructure obtenue à la suite de différents cycles de chargement. Il n'existe pas actuellement de meilleur outil que la simulation de dynamique des dislocations discrètes pour effectuer un tel travail. Il répond à la problématique posé en ce sens qu'il simule le mouvement d'ensembles de dislocations à partir du comportement et des propriétés élémentaires applicables à une seule dislocation. Ces outils sont désormais suffisamment fiables pour qu'on les utilise sans état d'âme pour effectuer des expériences virtuelles de comportement du matériau. Les microstructures sont tout d'abord analysées sur des bases conventionnelles issues des représentations habituelles dans les études. Toutefois cette "décortication", si elle permet de proposer des représentations

conformes au sens communément admis, n'amène pas de réelles révélations sur la microstructure. Une analyse originale des contraintes apporte alors le chaînon manquant, élément fondateur d'une représentation pertinente et exploitable des phénomènes se produisant dans la microstructure. Les variables d'état de la microstructure de dislocations sont alors évidentes et permettent de raisonner sur des comportements moyens de population type, amenant une réelle plus-value au niveau de la description du comportement et la perspective d'une transition d'échelles aboutie.

Le **second chapitre** est à ce stade presqu'une formalité. La physique étant correctement décrite, il n'est plus très difficile de proposer une modélisation qui relie variables d'états au comportement mécanique du volume élémentaire représentatif. Ce modèle reprend les équations déjà validées des modèles de plasticité auxquels il ajoute les compléments nécessaires apportés par l'analyse du chapitre 1. La modélisation est restreinte dans un premier temps à un seul système de glissement. Il existe en effet de nombreuses expériences portant sur des monocristaux en glissement simple qu'une modélisation sur un seul système est à même de décrire. La simplification évidente du travail qui en découle est toutefois un argument qu'on ne saurait réfuter. C'est pourquoi une extension du modèle sur les 12 systèmes de glissement est proposée mais moins exploitée dans cette thèse.

Le **troisième chapitre** explore les réponses du modèle relativement à différents cas de chargement. On montre que le caractère générique du modèle est avéré en lui faisant couvrir un large spectre de déformation : petite amplitude de déformation pour un chargement alterné et grande déformation pour un chargement monotone.

On termine enfin le mémoire par une **synthèse** où la portée de ce travail est discutée. Notamment les conséquences sur la modélisation plus macroscopiques sont envisagées. Cette discussion amène alors naturellement les perspectives qui font suite à ce travail.

CHAPITRE 1

Description des contraintes dans une microstructure de dislocations

SOMMAIRE

1 INTRODUCTION 13

2 DESCRIPTION DE L'OUTIL NUMERIQUE UTILISE 15

2.1 PRINCIPE DU FONCTIONNEMENT DU CODE DDD 15
2.2 LIMITATIONS DE LA MODELISATION DDD 18
2.3 CONCLUSION 19

3 ANALYSE QUALITATIVE D'UNE MICROSTRUCTURE 20

3.1 DESCRIPTION DE L'ESSAI NUMERIQUE REALISE 20
3.2 ANALYSE DE L'EVOLUTION DES GRANDEURS MECANIQUES 22
3.3 ANALYSE DESCRIPTIVE DE LA MICROSTRUCTURE 24
3.4 PASSAGE DU GRAIN DDD AU MONOCRISTAL 26
3.5 CONCLUSION 29

4 DESCRIPTION GLOBALE DE L'ETAT DE LA MICROSTRUCTURE 29

4.1 EVOLUTION DE LA DENSITE DE DISLOCATIONS 30
4.2 INSUFFISANCE DE LA DENSITE DE DISLOCATIONS : VERS UNE DESCRIPTION LOCALE DE LA MICROSTRUCTURE 34
4.3 EVOLUTION DES STRUCTURE DIPOLAIRES EN GLISSEMENT SIMPLE 35
4.4 CONCLUSION 38

5 DESCRIPTION LOCALE DE L'ETAT DE CONTRAINTE DANS LA MICROSTRUCTURE 38

5.1 DEFINITION DES CONTRAINTES A *COURTE* ET A *LONGUE* DISTANCE 39
5.2 REPARTITION DES CONTRAINTES A COURTE DISTANCE 42
5.3 REPARTITION DES CONTRAINTES A LONGUE DISTANCE 48
5.4 DISCUSSION 54

6 CONCLUSION 55

1 INTRODUCTION

Une analyse des microstructures de dislocations générées lors de la déformation plastique d'un cristal Cubique à Faces Centrées (CFC) est présentée dans ce chapitre. Le but poursuivi est de préparer l'écriture mathématique d'un modèle de plasticité cristalline construit sur des bases physiques (chapitre 2), apte à décrire le comportement plastique d'un monocristal CFC dans des conditions de chargement tant monotones que cycliques. Précisons toutefois que, entre autres hypothèses de départ, seul le glissement de dislocations est retenu dans la perspective de la modélisation de la plasticité. Les autres mécanismes potentiels (maclage, transformation de phase, diffusion ...) sont volontairement écartés, d'une part à cause de leurs effets réputés assez discrets dans les CFC aux niveaux de chargement et de température considérés ($T_{ambiante}$, $\varepsilon_{p,cum}$<100 %, $\frac{d\varepsilon_p}{dt}$<$10^{-1}$ s^{-1}) [**Saada** M45], et d'autre part pour la simplification évidente qui en résulte.

Dans l'identification du lien contrainte-déformation plastique, la principale difficulté réside dans le fait que, contrairement à la déformation élastique qui est toujours *homogène* dans un élément de volume de matériau homogène uniformément contraint, la déformation plastique présente un caractère *hétérogène* marqué. Les références bibliographiques décrivant ce point expérimentalement ne manquent pas, et permettent de prime abord, en se plaçant dans le cas le plus élémentaire d'une situation de glissement simple d'un monocristal, de distinguer deux manifestations distinctes de l'hétérogénéité induite. En effet, la première observation de l'hétérogénéité est assez ancienne puisque réalisable avec des moyens d'optique simples [**Jaoul** 08] : on constate que la déformation plastique globale résulte de déformations plastiques sur des plans ou groupements de plans localisés (bandes de glissement), séparés par des zones exemptes de déformation plastique.

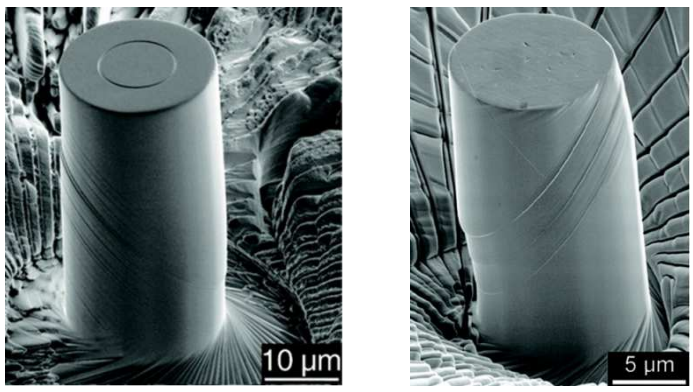


fig. 1 Marches en surface observée au MEB sur un micro-monocristal de Ni [**Dimiduk** *et al.* 05].

La seconde observation est plus récente car elle nécessite des moyens d'observation plus lourds et plus modernes. La microscopie électronique en transmission montre en effet une hétérogénéité de la répartition des dislocations au sein même d'une bande de glissement, ce qui conduit d'ailleurs souvent à affecter des noms particuliers à telle ou telle sous-structure (veines, mur, cellules…), fonction de la haute ou de la faible densité de dislocations qu'elle présente. Il est montré par diffraction aux rayons X que cette hétérogénéité de configuration des dislocations engendre une hétérogénéité de la déformation plastique au sein même du plan de glissement [**Suresh** 01], [**Essmann** *et* **Mughrabi** 79], conduisant ainsi souvent

les auteurs de modèles de plasticité à caractériser respectivement des phases « dure » ou « molle » les zones de haute et de faible densité de dislocations [**Mughrabi** 83].

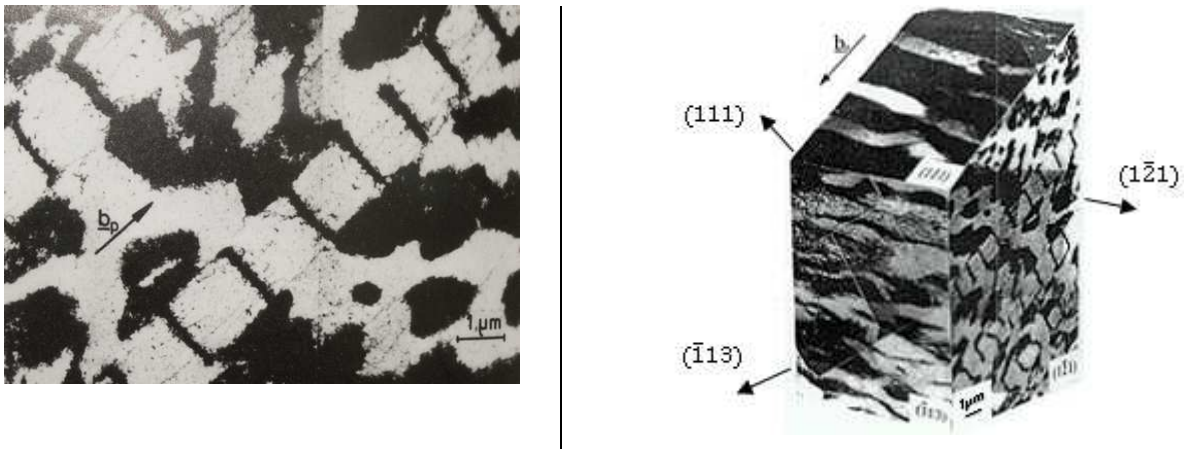


fig. 2 Microstructure de dislocations hétérogène obtenue en fatigue – cristal de Cu [**Mughrabi** *et al.*79].

Du fait de cette hétérogénéité, la déformation plastique n'est pas une variable d'état, au sens *thermodynamique* du terme : la seule donnée de la déformation plastique n'est en effet pas suffisante pour donner une information sur l'état thermodynamique du système puisqu'une même déformation plastique peut être obtenue avec des microstructures de dislocations largement différentes, donc avec des niveaux d'hétérogénéité différents, et donc conduire à des contraintes d'écoulement différentes. **C'est donc bien l'évolution de l'hétérogénéité au sein d'une microstructure de dislocations que l'on doit étudier et caractériser pour construire un modèle** physique de plasticité, puisque c'est elle qui conditionne l'évolution des *contraintes internes* (d'origine élastique) qui assurent la compatibilité de la déformation dans le matériau, et qui dictent l'évolution thermodynamique du système. Dans cette perspective, les étapes principales de ce chapitre sont donc de fournir :

- une description *qualitative* de l'état de la microstructure de dislocations et de son évolution, en vue de refaire un point sur les causes microstructurales induisant l'écrouissage dit isotrope, mais induisant aussi l'hétérogénéité responsable de l'écrouissage dit cinématique,
- une description *statistique* et *quantitative* de cette microstructure, qui enrichira la description habituelle n'utilisant que la seule densité de dislocations pour caractériser l'état de la microstructure,
- une description des contraintes internes (hétérogènes) dans la microstructure, *finalement seule et unique connaissance* requise pour réaliser la transition d'échelle micro-macro qui mène à l'écriture d'un modèle de plasticité cristalline. Une manière originale de les caractériser est finalement proposée.

Notons enfin pour terminer l'introduction de ce travail que les études sont effectuées sur des portions de cristal en condition de *chargement cyclique*, et pour la plupart en condition de *glissement simple* (un seul système de glissement activé). Le choix du chargement est simplement motivé par le fait que les trajets de fatigue mettent directement en évidence macroscopiquement l'effet des contraintes internes d'origine microstructurale sur la courbe contrainte-déformation (via l'effet Bauschinger). Le choix de l'orientation du cristal en glissement simple est simplement motivé par le fait que c'est la situation de plasticité la plus triviale, donc la plus simple à analyser. L'extension aux glissements multiples est traitée, mais dans le chapitre suivant.

2 DESCRIPTION DE L'OUTIL NUMERIQUE UTILISE

Une des manières les plus pragmatiques pour simuler la plasticité par mouvement de dislocations d'un cristal est de simuler directement le mouvement de chaque segment de dislocations à partir de la connaissance de son comportement individuel. C'est l'objet des codes de Dynamique des Dislocations Discrètes (DDD). Ceci présente un avantage et un inconvénient.

- L'avantage est qu'on parvient avantageusement de cette façon à obtenir numériquement à la fois une microstructure de dislocations réaliste (constituée d'une population plus ou moins importante de segments) et la réponse mécanique qui lui est associée.
- En contrepartie, le coût CPU d'un tel calcul est très important vu le nombre important d'entités à gérer, ce qui limite l'utilisation de l'outil à des densités de dislocations faibles, des volumes simulés faibles, et des taux de déformation plastique faibles.

Le principe de fonctionnement et les autres limites de ces codes DDD sont donnés dans les paragraphes suivants.

2.1 PRINCIPE DU FONCTIONNEMENT DU CODE DDD

Le code de Dynamique des Dislocations utilisé dans ce travail de thèse pour analyser les microstructures de dislocations et les mettre en relation avec la réponse mécanique est un code tridimensionnel. Il est dédié à l'étude des structures CFC. Le lecteur pourra trouver dans [**Verdier** *et al*. 98] plus de détails sur les fondements de la version utilisée. La figure ci-dessous met en évidence l'aspect général pris par une simulation : la microstructure de dislocations évolue ici dans une boîte de simulation fermée lors d'un trajet de chargement cyclique en déformation plastique imposée $\Delta\gamma_p=6\cdot10^{-4}$ sur le système B4 : $\frac{a}{2}[1\,1\,0]\,(1\,\bar{1}\,\bar{1})$. On remarque que la densité de dislocations augmente, ce qui augmente le temps de calcul de chaque itération au fur et à mesure de la simulation. Plus de détails (conditions initiales, conditions de chargement) … sont donnés au paragraphe 3 lors de l'exploitation complète d'une simulation.

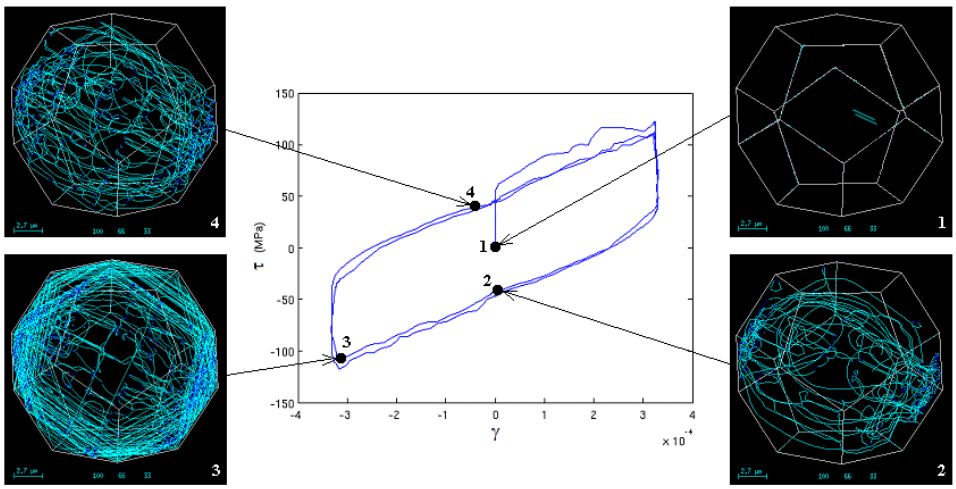
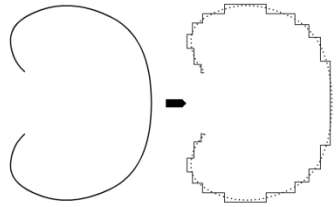
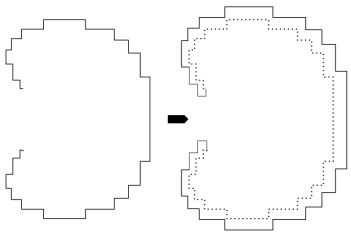


fig. 3 Microstructure de dislocations générée par sollicitation cyclique d'un grain CFC orienté en glissement simple et cycle associé {Cission résolue sur le système B4 – Déformation plastique}.

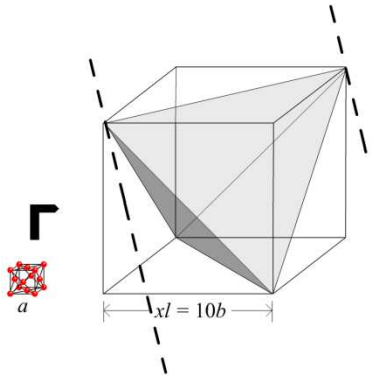
Techniquement, le code repose premièrement sur des *discrétisations* des lignes de dislocations, du temps, et de l'espace. Deuxièmement, les dislocations s'animent grâce à des *lois locales* qui gèrent tous les aspects de leur comportement (mouvement dans leur plan de glissement, annihilation, changement de plan de glissement par glissement dévié …). On note toutefois que certains aspects du comportement réel des dislocations, tels que les annihilations des dislocations coins par montée par exemple, ne sont pas pris en compte. Les figures 4 et 5 qui suivent résument ces deux fondements.



(a) les lignes de dislocations sont une succession de segments vis et de segments coin.



(b) les positions sont calculées à des instants discrets par intégration explicite de la vitesse sur un pas de temps δt .



(c) les dislocations bougent sur un réseau homothétique de l'espace CFC réel (qui est déjà, par nature, discret). Le pas du réseau DDD, noté *xl*, est souvent de 10*b*. Simuler le cristal réel augmenterait de façon prohibitive le nombre de positions à gérer. Les pointillés représentent les positions possibles d'une dislocation coin dans le réseau DDD.

fig. 4 Principe de la triple discrétisation sur laquelle repose le code DDD.

On remarque que, parmi les opérations effectuées à chaque pas de calcul, l'une des opérations les plus coûteuses est le calcul de la contrainte interne $\boldsymbol{\sigma}_{mic}$ (voir figure 5). Le calcul de la contrainte induite par une microstructure constituée de *N* segments de dislocations sur un segment donné requiert *N* calculs : le coût CPU augmente donc comme N^2. Les autres opérations (mouvement, discrétisation …) augmentent linéairement avec *N*. A titre d'exemple, les données d'entrée pour la mise en place d'une simulation en DDD du comportement mécanique d'un monocristal de Cuivre, sont recensées dans le tableau ci-dessous :

Caractéristiques	Paramètres	Valeurs
Condition initiales	**Microstructure de dislocations & Géométrie et volume du grain :**	ϕ = 20 µm
Matériau	**Module de cisaillement :**	μ = 45 GPa
	Coefficient du Poisson :	ν = 0,3
	Vecteur de Burgers :	b =0,256 nm
	Friction de réseau :	τ_{fr} = 4 MPa
Chargement	**Chargement en contraintes – incrément de cission appliquée :**	$\Delta\tau = 5 \cdot 10^{8}$ MPa/s
	Amplitude de déformation plastique imposée :	$\Delta\gamma = 3 \cdot 10^{-3}$
Discrétisation	**Temps – pas de temps :**	$\Delta t = 2 \cdot 10^{-10}$ s
	Espace – paramètre de maille CFC :	xl = 2,56 nm

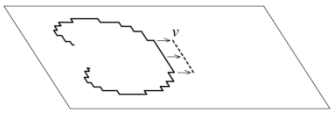
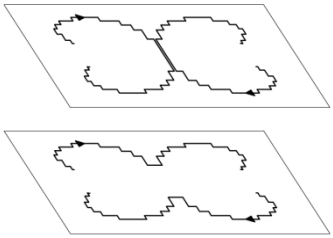
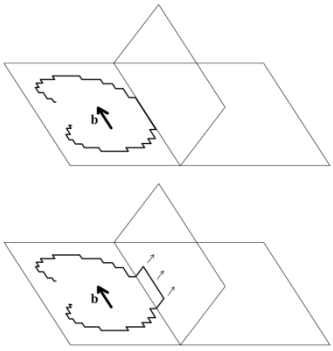
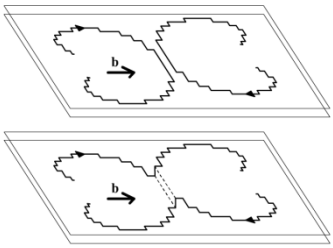
	Type de comportement	Commentaire
Glissement sur le plan		**Tenseur vu par un segment** : $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{app} + \boldsymbol{\sigma}_{mic}$, représentant respectivement les tenseurs appliqués et créés par les autres segments de la microstructure. **Cission effective** : $\tau^* = \tau^{**} - \text{sign}(\tau^{**})\tau_{fr}$ avec $\tau^{**} = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{b}\times\mathbf{l}.\mathbf{g} + \tau_{TL}$, où **b**, **l** et **g** sont respectivement les vecteurs de Burgers, de ligne, et de vol de la dislocation. τ_{TL} et τ_{fr} sont la tension de ligne et la friction de réseau. **Loi de comportement** : la vitesse du segment est donnée par $v = \frac{b}{B}\tau^*$, B étant un coefficient de viscosité représentant l'interaction dislocations-phonons. Le déplacement de la dislocation est donné par intégration explicite de v : $dx = v\delta t$. **Déformation plastique accommodée par un segment** : $d\gamma = b\frac{dA}{V}$ où dA est l'aire balayée par la dislocation, V le volume d'homogénéisation. **Déformation totale induite par un segment** : $d\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}((\mathbf{n}\otimes\mathbf{b})+(\mathbf{b}\otimes\mathbf{n}))d\gamma$
Annihilation		Deux dislocations de signes opposés (vis ou coin) se déplaçant sur le même plan de glissement s'annihilent lorsqu'elles se croisent.
Glissement dévié		Une loi de probabilité : $P_{GD} = \beta\frac{l}{l_0}\frac{\delta t}{t_0}\exp\left(\frac{\tau_{dev} - \tau_{III}}{kT}V_{act}\right)$ gère le glissement dévié des dislocations vis. La probabilité est d'autant plus élevée que la longueur de dislocation l est grande, que la température T est grande. τ_{dev} est la cission résolue sur le plan de glissement dévié de la dislocation.
Montée		Non pris en compte.

fig. 5 Lois locales gérant le comportement des dislocations.

2.2 LIMITATIONS DE LA MODELISATION DDD

Outre les limitations matérielles liées au temps CPU important requis par la masse considérable de calcul à effectuer, la modélisation DDD présente des limitations inhérentes aux trois discrétisations qui la fondent. L'analyse d'une sous-structure de dislocations élémentaire, nommée dipôle[1], constituée simplement de deux segments de dislocations de signes opposés, met en évidence ces différentes limitations. Cette sous-structure, lorsqu'elle est composée de dislocations à caractère coin glissant sur des plans voisins distants de h, présente une résistance à la destruction [**Catalao** *et al.* 05] donnée par :

$$\tau = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)h}$$

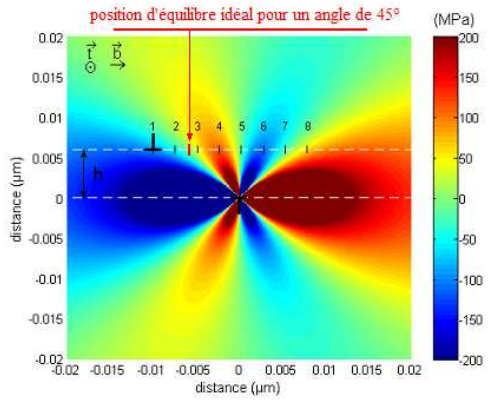
La fiabilité du code DDD est déterminée en chargeant une microstructure composée d'un dipôle de hauteur h, et d'observer la cission à laquelle ce dipôle est détruit.

- Du fait de la discrétisation spatiale imposant un réseau DDD homothétique du réseau CFC réel, tous les dipôles potentiellement présents en réalité ne peuvent être construits en DDD. A titre illustratif, le tableau ci-dessous montre l'éventail de hauteurs de dipôle possibles en fonction du pas de réseau xl déterminant la taille du réseau DDD (voir figure 4(c)). Le pas de réseau étant généralement pris égal à $10b$, on constate que de nombreuses formations de dipôles avec la simulation DDD sont inaccessibles.

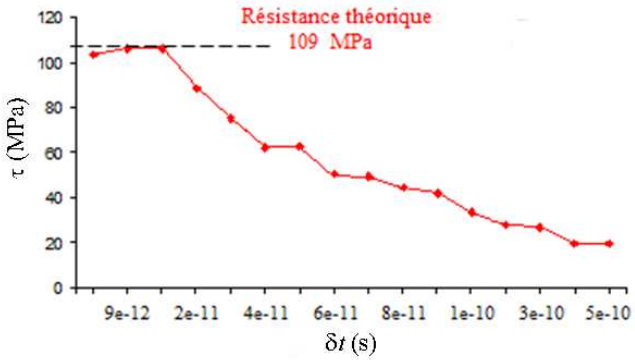
Pas de réseau xl	**Hauteurs** h **possibles**
a = 0,35 nm (cristal réel)	0,8 nm ; 1,6 nm ; 2,4 nm
$5b$ = 5×0,25 nm = 1,25 nm	2,9 nm ; 5,8 nm ; 8,7 nm …
$10b$ = 10×0,25 nm = 2,5 nm	5,8 nm ; 11,6 nm ; 17,32 nm …

- Du fait de la discrétisation temporelle, l'intégration explicite de la vitesse d'un segment sur un pas de temps δt pour trouver la position suivante est peu performante lorsque les variations de la contrainte sur le plan de glissement sont de faible longueur d'onde. A titre d'exemple, considérons le champ de contrainte résolue généré par une dislocation coin dans son environnement (figure 6 (a)). Considérons alors une autre dislocation coin, de signe opposé à la première, qui se déplacerait sur un plan de glissement éloigné de h=5,8 nm. Cette situation génère naturellement un dipôle. On remarque alors que, du fait de la discrétisation spatiale, la dislocation ne peut se maintenir dans sa position d'équilibre naturelle qui est à 45° par rapport à la première : elle peut en effet se trouver uniquement aux positions repérées 1, 2 …8. Elle a donc toutes les chances, lorsqu'aucun chargement n'est appliqué, d'osciller à chaque pas de temps entre les positions 2 et 3, l'état de contrainte régnant dans ces deux positions tendant à se « renvoyer » mutuellement la dislocation. Toutefois, si le pas de temps est grand, elle pourrait osciller entre 2 et 8, pour les mêmes raisons. La dislocation ferait alors cela sans voir qu'elle traverse dans son mouvement un champ de contrainte important et variable qui en réalité modifierait son comportement. Pour les mêmes raisons, on constate alors que la contrainte de rupture d'un dipôle est largement sous-estimée lorsqu'on utilise des pas de temps de l'ordre de 10^{-10} s, comme c'est le cas dans les simulations habituelles en DDD. La figure 6(b) montre cet effet.

[1] On s'intéresse particulièrement à cette sous-structure du fait que, comme on le verra dans les prochains paragraphes, celle-ci joue un rôle important dans l'écrouissage d'un système de glissement.



(a) champ de contrainte de cisaillement autour d'une dislocation coin, et positions potentiellement prises par une dislocation coin de signe opposé se déplaçant dans un plan de glissement voisin éloigné de h = 5,8 nm.



(b) contrainte de rupture d'un dipôle de 6nm en fonction du pas de temps du calcul DDD : on remarque que ce n'est qu'à partir d'un pas de temps d'environ 10^{-11} s que la résistance réelle est bien reproduite.

fig. 6 Erreur induite par la discrétisation spatiale et temporelle.

2.3 CONCLUSION

La modélisation en Dynamique des Dislocations doit être considérée comme un outil de prospection, permettant de comprendre les mécanismes impliqués dans la déformation plastique d'un cristal et les mettre en relation avec les grandeurs mécaniques de l'échelle supérieure. Elle peut donner directement des valeurs absolues, seulement dans les cas particuliers où les pas de temps et de réseau sont pris très faibles. Dans les simulations qui font l'objet des paragraphes suivants de ce chapitre, les pas de temps sont de l'ordre de 10^{-10} s et le pas de réseau de 10b. Ceci permet de simuler une déformation plastique cumulée de l'ordre de 10 % pour des cristaux de diamètres d'environ 10 µm, avec des temps de calculs qui restent raisonnables. Nous sommes donc dans un domaine de discrétisation susceptible de masquer des événements.

3 ANALYSE QUALITATIVE D'UNE MICROSTRUCTURE

Dans cette partie, on s'attache à visualiser une microstructure de dislocations obtenue en Dynamique des Dislocations Discrètes, dans le but de mettre en évidence :

- l'organisation générale d'une microstructure de dislocations, mais aussi plus précisément les configurations spatiales particulières prises par les dislocations, afin de se remémorer les mécanismes d'écrouissage du cristal (y a-t-il des dislocations qui *écrouissent plus* le cristal que d'autres ?),
- la manière dont les dislocations s'accumulent ou disparaissent dans le cristal, afin d'enrichir la connaissance des lois de productions de dislocations (y a-t-il des dislocations qui *s'accumulent plus* dans le cristal que d'autres ?),
- le lien entre le mouvement des différents types de dislocations et le cycle mécanique macroscopique, afin de mettre en évidence les dislocations dites mobiles, qui accommodent la majeure partie de la déformation plastique imposée (y a-t-il des dislocations *plus mobiles* que d'autres ?)

Outre les différents éléments de réponses que ce paragraphe tente d'apporter, l'objectif est surtout de présenter globalement une microstructure qui est ensuite analysée plus méthodiquement (§ 4 et 5) avec des outils statistiques, avec comme point de mire la mise en exergue de grandeurs globales décrivant correctement une microstructure de dislocations, utiles à toute modélisation de plasticité cristalline.

3.1 DESCRIPTION DE L'ESSAI NUMERIQUE REALISE

L'essai numérique a été réalisé dans les conditions suivantes : une microstructure de dislocations initiale, consistant en un simple segment de dislocation à caractère coin de longueur 2 µm, ancré à ses extrémités et appartenant au système $\frac{a}{2}[1\ 1\ 0]\ (1\ \bar{1}\ \bar{1})$, a été introduite dans un grain cylindrique, dont les paramètres de base (module de cisaillement, probabilité de glissement dévié) représentent ceux du *cuivre*.

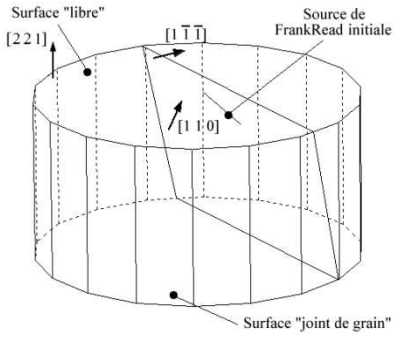


fig. 7 Boîte de simulation (« grain ») et sa microstructure initiale constituée d'une source de Frank-Read.

Ce grain est chargé avec un tenseur des contraintes de cisaillement pur, uniforme dans le grain, produisant sur le système sus mentionné une cission résolue maximale (notée τ), dont on précise plus loin l'évolution :

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau \\ 0 & \tau & 0 \end{pmatrix}_{\{\bullet,[1\,1\,0],\,[1\,\bar{1}\,\bar{1}]\}}$$

Le segment se comporte sous l'effet du chargement comme une source de Frank-Read, et est suffisant pour générer après quelques pas de calcul une microstructure de dislocations réaliste, occupant plusieurs plans de glissement parallèles. Cette distribution du glissement plastique sur des plans parallèles est rendue possible grâce au mécanisme de glissement dévié, qui permet à une dislocation vis du système initial de poursuivre son glissement sur un autre plan de glissement, en changeant momentanément de système de glissement : $\frac{a}{2}[1\,1\,0]\,(1\,\bar{1}\,1)$. Notons par ailleurs que les 10 autres systèmes de glissements du réseau CFC n'ont pas été introduits dans le grain, simplement parce que l'amplitude de la cission τ reste suffisamment faible pour ne pas activer ces systèmes (le second système le plus chargé subit $0{,}6\,\tau$).

Le grain cylindrique a une taille modérée (hauteur 5µm, diamètre ∅ 10 µm), pour obtenir une microstructure numérique avec un nombre de segments limités à 4000 mais avec des densités de l'ordre de $5{\cdot}10^{12}$ m^{-2}. Les données inhérentes à la microstructure sont enregistrées jusqu'à une déformation cumulée d'environ 10 %. La particularité de ce grain réside dans le fait qu'il présente une surface libre de vecteur normale [2 2 1], à travers laquelle les dislocations peuvent s'échapper, comme si le grain modélisait un grain de surface d'un polycristal réel. Ce choix est motivé par les deux arguments suivants.

- Il est plus facile de simuler en DDD un cristal présentant des faces fermées (i.e. un grain de polycristal), la simulation d'un monocristal avec faces ouvertes présentant une tendance naturelle à la restauration, même avec l'introduction de conditions périodiques obligeant une dislocation quittant une face à se représenter sur la face opposée [**Fivel** 97]. La génération d'une microstructure de dislocations de densité croissante dans ces conditions imposerait d'introduire une microstructure initiale (réaliste) déjà complexe, ce qui n'est pas évident.
- Travailler en grain semi-ouvert (i.e. un grain de surface d'un polycristal) présente l'avantage de diminuer l'effet du joint de grain (voir paragraphe 3.4) tout en offrant l'avantage du grain fermé en ce sens qu'il favorise l'activation de plusieurs plans de glissements parallèles lorsque le glissement se trouve bloqué sur un plan. Il est montré [**Déprés** *et al.* 04] que la réponse mécanique d'un grain semi-ouvert de hauteur h correspond de près à la réponse mécanique d'un grain fermé de hauteur $2h$: on a ainsi un moyen d'obtenir à coût de segments de dislocations deux fois moindre des réponses mécaniques identiques.

Pour terminer, la définition de la simulation est complétée par la loi d'évolution du tenseur $\boldsymbol{\sigma}$ (ou encore ici de τ) en fonction du temps. Le grain est soumis à un *chargement cyclique* afin de mettre en évidence facilement l'effet des contraintes internes sur le comportement mécanique macroscopique. Afin de s'assurer de l'obtention d'une même déformation plastique cumulée à chaque cycle, on pilote les variations de la déformation plastique[2] (voir figure 8) et on asservit l'évolution de la contrainte à cette grandeur, conformément à la pratique expérimentale usuelle.

- L'amplitude de la déformation plastique $\Delta\gamma_p = 2{\cdot}10^{-3}$: une déformation plastique cumulée de l'ordre de 0,1 est alors obtenue en une vingtaine de cycles avec un temps CPU d'environ 3 semaines.

[2] La déformation plastique est calculée en divisant la quantité de glissement plastique (aire balayée par les dislocations × b) sur le système par le volume du **grain**.

- La vitesse de déformation plastique est fixée à $\frac{d\gamma_p}{dt} = 10^4\ s^{-1}$: cette valeur, très élevée, découle plus d'une limite de la DDD que d'un choix volontaire. Le pas de temps étant en effet de $2{\cdot}10^{-10}$ s, simuler le temps réel est inenvisageable. La répercussion de cette augmentation des vitesses de chargement se traduit principalement au niveau des mécanismes dépendant du temps, comme le glissement dévié, puisqu'on risque d'omettre des événements. Pour pallier à cette difficulté, la probabilité de glissement dévié est artificiellement augmentée suivant des arguments théoriques [**Robertson** *et al.* 01].

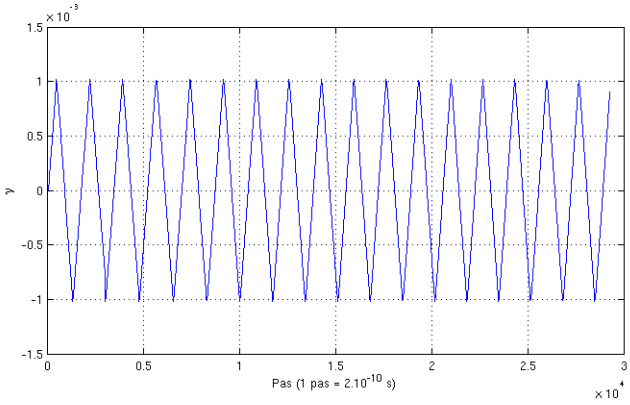


fig. 8 Consigne en déformation plastique suivie par le grain. Au total, 17 cycles sont réalisés, en 30000 pas.

Le tableau ci-dessous résume les paramètres importants de la simulation étudiée dans la suite :

Pas de temps δt	Pas de réseau *xl*	Longueur moyenne d'un segment	Friction de réseau	Tenseur	$\Delta\gamma_p$	$\frac{d\gamma_p}{dt}$
$2{\cdot}10^{-10}$ s	10b=25,4 Å	300 nm	6 MPa	$\sigma = \tau/\sqrt{6}\,([1\,1\,0]\otimes[1\,\bar{1}\,\bar{1}])^{Sym.}$	$2{\cdot}10^{-3}$	$10^4\ s^{-1}$

3.2 ANALYSE DE L'EVOLUTION DES GRANDEURS MECANIQUES

L'application d'une déformation plastique imposée $\Delta\gamma_p = 2{\cdot}10^{-3}$ entraine la propagation rapide du glissement plastique à d'autres plans de glissement parallèles au plan de la source initiale (figure 9). Dès la fin du premier cycle, environ 4 à 5 groupements de plans de glissement se sont formés de façon autonome. Ces groupements sont désignés par « bandes de glissement » dans la suite du rapport.

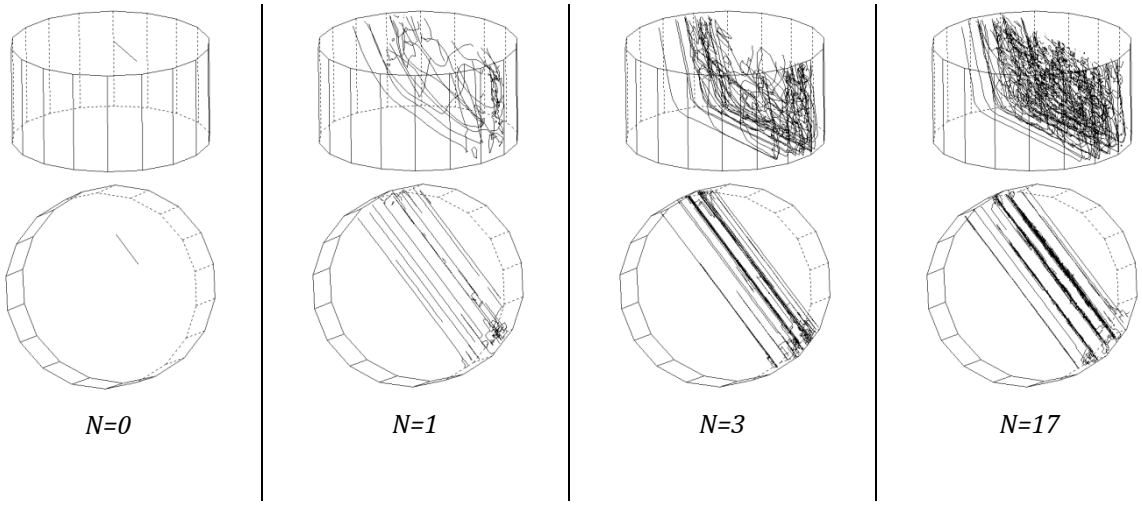


fig. 9 Formation de la microstructure et son évolution avec le nombre de cycle *N*.

L'évolution en densité de cette microstructure se traduit mécaniquement par une évolution de la cission appliquée sur le système primaire $\frac{a}{2}[1\ 1\ 0]\ (1\ \bar{1}\ \bar{1})$, comme cela est mis en évidence sur la figure 10.

- Le premier cycle, volontairement dessiné en pointillé, présente une amplitude importante. Ce comportement mécanique spécifique s'explique par le fait que la situation de départ créée par la microstructure initiale élémentaire est doublement défavorable pour accommoder la déformation plastique imposée, d'abord par manque de dislocations disponibles pour suivre la consigne en déformation imposée, et ensuite par effet de localisation puisque toute la déformation plastique est confinée sur un plan. Ainsi, ce premier cycle doit plus être considéré comme un cycle permettant de créer une microstructure initiale exploitable que comme un « vrai » cycle mécaniquement analysable.
- Les cycles suivants, représentés en traits continus, mettent en évidence un durcissement cyclique régulier, augmentant l'amplitude de la cission τ appliquée d'une petite dizaine de MPa. On remarque donc bien là un effet d'écrouissage de la microstructure.

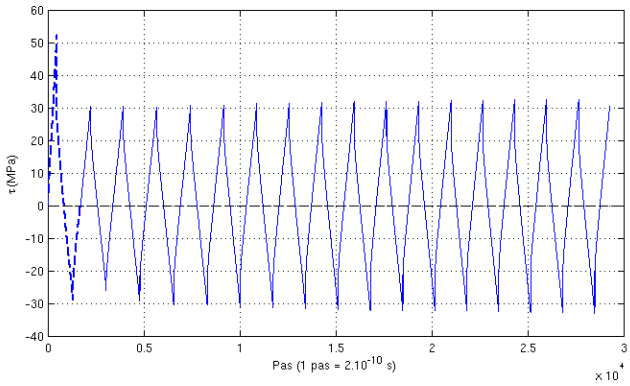


fig. 10 Evolution de la cission appliquée sur le système $\frac{a}{2}[1\ 1\ 0]\ (1\ \bar{1}\ \bar{1})$.

Une description plus riche de l'écrouissage est toutefois obtenue en lisant la courbe cission τ – déformation plastique γ_p sur la figure 11. Cette courbe d'hystérésis se caractérise par :

- un premier cycle inexploitable, pour les raisons évoquées précédemment,
- des cycles suivants présentant un écrouissage cinématique linéaire marqué, de pente identique, qui procurent un effet Bauschinger vraiment très important,
- une évolution de la contrainte isotrope, passant de 4 - 5 MPa (friction de réseau) à 10 MPa,
- un régime transitoire au début du changement du sens de chargement faiblement marqué (il a lieu sur une déformation plastique d'environ $0{,}3\cdot10^{-3}$), qui traduit toutefois que l'écrouissage cinématique linéaire se met en place de façon continue, avec un module tangent passant de façon progressive de l'infini à une valeur constante.

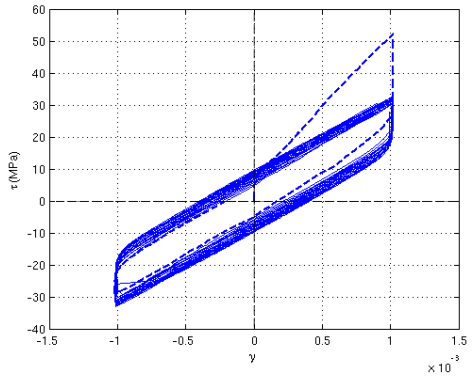


fig. 11 Boucle d'hystérésis correspondant à l'essai.

Cette description brute du comportement mécanique macroscopique est à mettre en parallèle avec la description en image de la microstructure de dislocations construite. C'est l'objet du paragraphe suivant.

3.3 ANALYSE DESCRIPTIVE DE LA MICROSTRUCTURE

La microstructure est observée à quatre instants du dernier cycle simulé, sur une lame mince de 100 nm d'épaisseur prélevée au sein d'une bande de glissement (figure 12). On part du maximum de déformation plastique imposée (repére ①) pour atteindre une déformation imposée nulle (repére ④). Au maximum de déformation plastique imposée (repère ①), cette microstructure fait apparaître :

- des lignes de dislocations courtes, fermées et non coplanaires, qui font office de dipôles de dislocations,
- des lignes de dislocations longues, et qui font pour beaucoup partie d'empilements.

Les empilements sont de deux types. Le premier résulte de l'effet direct de la présence du joint de grain, qui par construction stoppe (artificiellement en DDD pour la première ligne de dislocations, et sous l'effet de la contrainte interne pour les suivantes) le glissement des dislocations. Le second se crée sous l'effet des dipôles de dislocations, qui par leur effet durcissant empêchent localement le passage d'autres dislocations dans leur environnement proche et provoquent ainsi une hétérogénéité de déformation plastique dont la compatibilité est assurée par la présence des dislocations s'empilant contre eux.

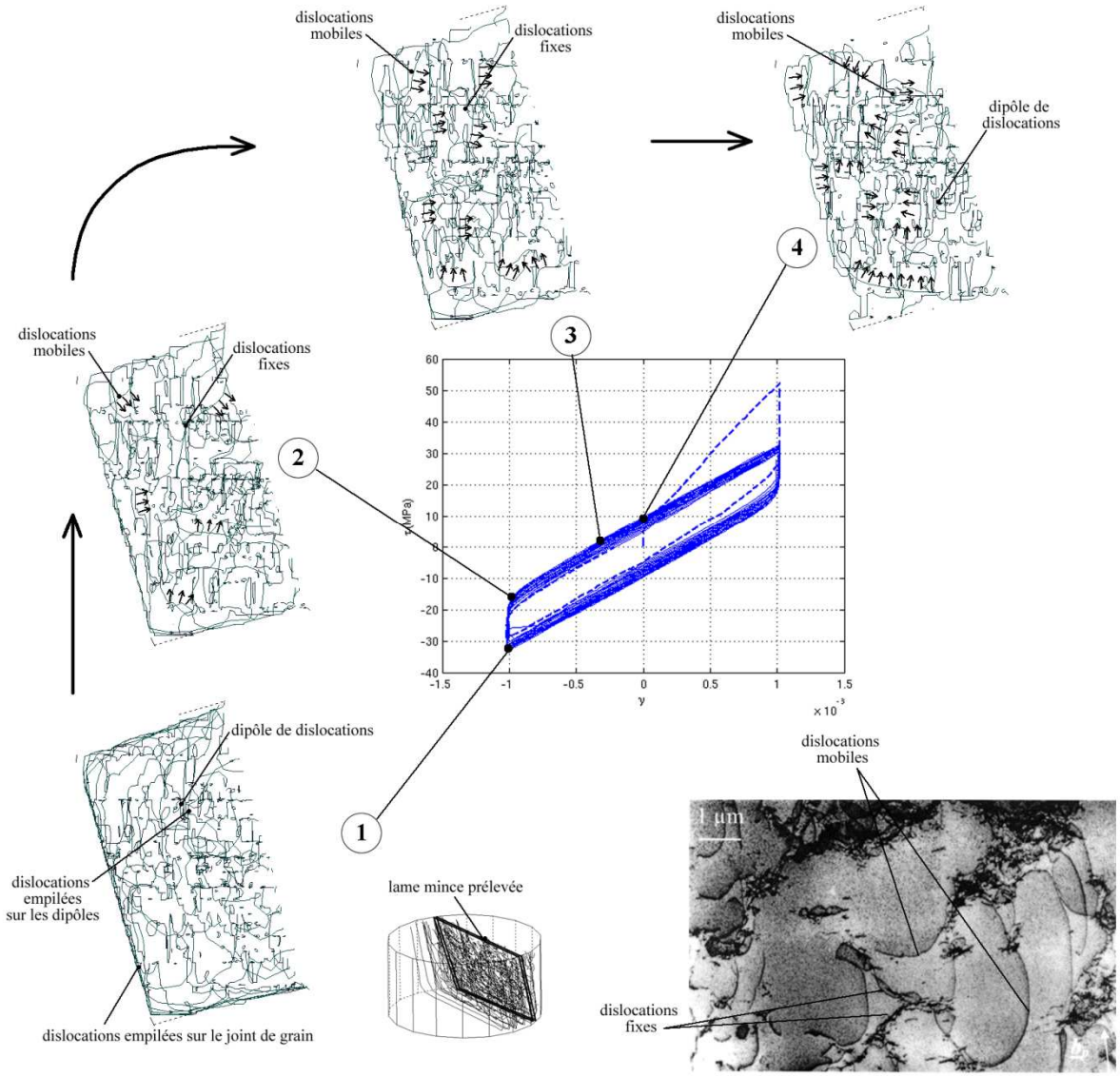


fig. 12 Détail de la microstructure dans une bande de glissement, à quatre moments du dernier cycle. Microstructure observée en fatigue en glissement simple d'un monocristal de Cu [**Mughrabi** 01].

Lorsque le sens de la consigne en déformation plastique est changé pour atteindre une déformation plastique imposée nulle, on parvient à mieux comprendre la responsabilité des deux catégories citées précédemment dans le glissement plastique. On remarque au début de la décharge (repère ②) que :

- les lignes dipolaires subsistent pour la plupart. Ces dislocations ne sont pas ou peu mobiles, n'accommodent que très peu de glissement plastique et agissant comme de véritables obstacles pour les dislocations mobiles,
- les dislocations empilées sur le joint de grain ou contre les dipôles sont mobiles immédiatement, et accommodent toute la déformation plastique imposée.

Lorsque la décharge continue (repère ③), les mécanismes restent les mêmes :

- les lignes dipolaires subsistent,
- le nombre de dislocations mobiles augmente globalement.

On remarque toutefois que certains dipôles sont brisés et deviennent alors sources de dislocations (mécanisme de Frank-Read), et donc que les lignes qui les constituent deviennent mobiles.

Enfin, à déformation imposée nulle (repère ④), on constate :

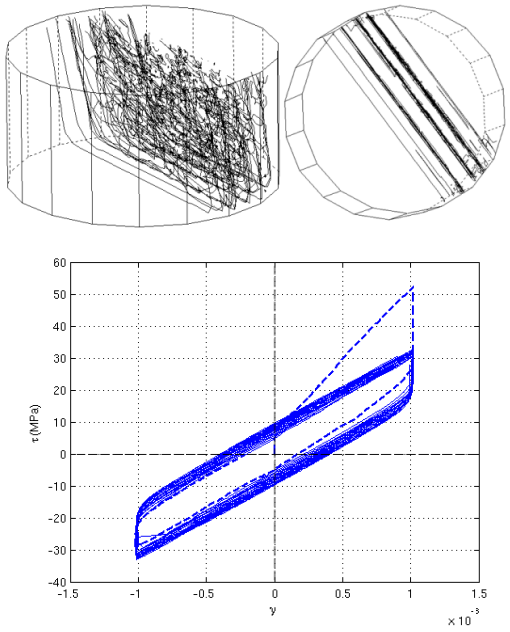
- que des lignes dipolaires existent en grand nombre, mais que très peu de dipôles restent stables et se comportent pour la plupart comme des sources de dislocations,
- que des dislocations glissent dans tous les sens,
- qu'il n'existe pratiquement plus de dislocations longues, telles qu'on pouvait les trouver empilées à déformation plastique maximale : la disparition des dislocations longues n'est toutefois pas une annihilation telle qu'on la conçoit habituellement (dislocations de signe opposé s'annihilant), mais doit plutôt être vue comme une boucle de Frank-Read fonctionnant en sens contraire.

Cette description met en lumière deux catégories de dislocations. Certaines peu mobiles s'accumulent et créent des obstacles au glissement plastique. D'autres s'accumulent temporairement sous forme d'empilement contre le joint de grain ou contre les obstacles de type dipôle et avant leur arrêt ont produit grâce à leur mobilité facile la déformation plastique imposée. Cette catégorisation, effectuée visuellement à partir de photographies à plusieurs instant de la microstructure, n'est pas idéale car non-exploitable directement par quelconque méthode mathématique mais elle sert avantageusement de concept de base pour mieux appréhender les analyses plus formelles qui sont exposées dans les paragraphes 4 et 5.

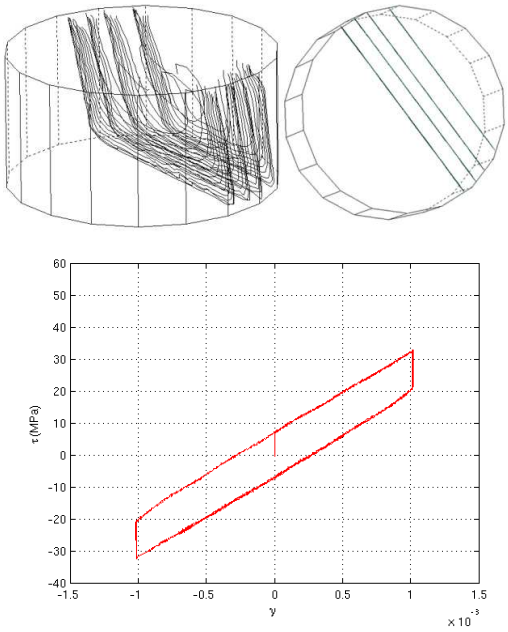
3.4 PASSAGE DU GRAIN DDD AU MONOCRISTAL

L'inconvénient des situations mises en œuvre dans les simulations de Dynamique des Dislocations précédentes est que l'on obtient un comportement assez inusuel, puisque non-reproductible par un quelconque essai mécanique : en effet, ces caractéristiques résulte de l'effet combiné de la microstructure de dislocations et du joint de grain dans un grain *unique isolé*, pour lequel il est illusoire d'obtenir expérimentalement la mesure de la réponse mécanique. Par ailleurs, l'effet d'un joint de grain réel est plus complexe que ne le laisse entrevoir la simulation DDD : en effet, le grain baigne non pas dans un milieu élastique non déformable plastiquement, mais est entouré d'autres grains dont la déformation généralement incompatible engendre des contraintes importantes sur le grain considéré. Pour cette raison, et puisque l'expérience nous permet d'obtenir les caractéristiques mécanique d'un *monocristal*, il est donc souhaitable de dé-corréler les effets, afin d'obtenir de la simulation DDD la part qui relève de la microstructure de dislocations propre du monocristal, et celle qui relève du joint de grain.

Ce travail n'est en soi pas complexe, au vu de la distinction entre dislocations proposée au paragraphe 3.3 qui met clairement en évidence les dislocations empilées sur le joint de grain. L'effet de ces dislocations sur le comportement macroscopique du grain s'évalue facilement en DDD. En remarquant que la microstructure de dislocations est formée de 4 bandes de glissement dès les premiers cycles (voir figure 9 ou 13(a)), on crée une simulation spécifique qui mesure l'effet produit par le glissement plastique de 4 plans de glissement pour lesquels le glissement dévié est inhibé (voir figure 13(b)). On obtient alors dans ce cas exclusivement une structure de dislocations empilées sur les interfaces qui n'existerait pas pour un monocristal.



(a) Cycle mécanique induit par une microstructure complexe constituée de 4 bandes de glissement



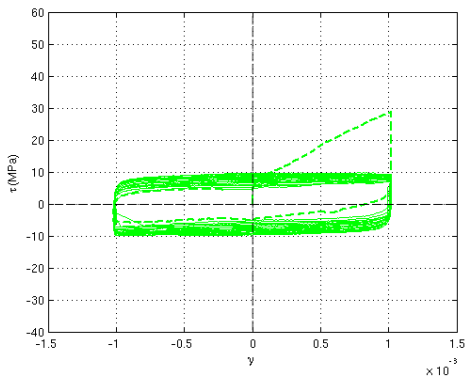
(b) Cycle mécanique induit par une microstructure fictive constituée de 4 plans de glissements dans lesquels le mouvement des dislocations reste confiné par inhibition forcée du glissement dévié.

fig. 13 Mise en évidence de l'effet macroscopique des dislocations empilées contre le joint de grain.

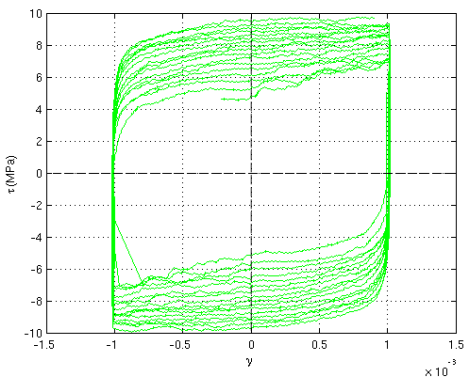
On constate donc que ce sont les empilements contre les joints de grain qui sont à l'origine de l'écrouissage *purement linéaire* sur le cycle macroscopique et conjointement du puissant effet Bauschinger qui l'accompagne. On détermine le facteur K de proportionnalité entre la contrainte créée par ces empilements et la déformation plastique cumulée. Pour obtenir le comportement du monocristal on retranche la contrainte produite par les empilements calculée au moyen de la relation linéaire de dépendance avec la déformation :

$$\tau_{\text{monocristal}} = \tau - K\,\gamma_p$$

On obtient alors grâce à cette méthode un comportement mécanique représentatif d'un comportement de type monocristallin dans un milieu à bords libres dont l'allure est tracée ci-dessous.



(a)



(b)

fig. 14 Boucles d'hystérésis correspondant à l'essai.

Ces cycles d'hystérésis appellent plusieurs remarques.

- Le premier cycle est bien-sûr aberrant, conformément à ce qui a été précisé précédemment. Il a d'ailleurs été retiré sur la figure 14(b), ce qui permet un tracé en pleine échelle plus parlant ;
- Il existe un écrouissage isotrope, traduit par l'augmentation de l'amplitude de la contrainte à chaque cycle.
- Il demeure un effet Bauschinger très léger, synonyme de la présence d'un écrouissage cinématique, qui reste assez discret : au changement du signe de la consigne en vitesse de déformation plastique, la contrainte atteint vite sa valeur de saturation sur le cycle considéré après une période transitoire d'environ $1{\cdot}10^{-3}$ de déformation.

On constate donc que la tâche fixée dans ce chapitre qui est d'identifier les sources d'hétérogénéité dans la microstructure à l'origine de l'écrouissage cinématique, prend place dans un contexte quelque peu *défavorable*. La DDD ne permettant pas de simuler une déformation cumulée très importante avec de grandes densités de dislocations, les niveaux d'hétérogénéité (et donc leurs effets) restent faibles. Les étudier requiert donc la mise en place d'outils numériques de mesure fiables pour l'analyse de l'évolution de la microstructure numérique dans la zone transitoire juste après le changement de sens de déformation plastique. Parallèlement, il faut faire preuve de suffisamment de pertinence et de clairvoyance pour extrapoler les résultats obtenus sur des densités de dislocations faibles vers des densités élevées, et par suite de la plus grande prudence si l'on envisage d'élever une règle d'évolution identifiée en DDD au rang de loi.

Comparativement aux données expérimentales, les données issues de la DDD s'avèrent assez ressemblantes, au moins qualitativement. La figure ci-dessous montre le comportement mécanique d'un monocristal de cuivre mesuré par Mughrabi [**Mughrabi** 78], lors d'un cyclage en amplitude de déformation plastique imposée de $3{\cdot}10^{-3}$ à température ambiante.

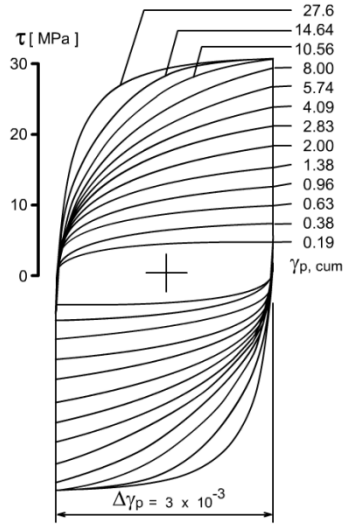


fig. 15 Boucles d'hystérésis mesurées dans le Cuivre monocristallin.

On constate que la forme des premiers cycles (jusqu'à environ 100 % de déformation plastique cumulée sur la figure ci-dessus) est bien respectée : ils présentent peu d'écrouissage cinématique (effet Bauschinger peu marqué). On constate toutefois que les simulations DDD ont tendance à faire évoluer

l'écrouissage isotrope trop rapidement. Ainsi 17 cycles à $2 \cdot 10^{-3}$ d'amplitude suffisent en DDD pour faire augmenter la contrainte isotrope de 5 MPa à 10 MPa, tandis qu'expérimentalement 160 cycles (soit $\gamma_{p,cum}=0,96$) à $3 \cdot 10^{-3}$ d'amplitude sont nécessaires. Cette caractéristique est notée dans [**Déprés** 04], et met en évidence une faiblesse de notre modélisation DDD qui soit produit des microstructures de dislocations totalement réversibles (toutes les dislocations produites à la charge « s'effacent » à la décharge), soit en produit trop vite si le « bon » paramètre de glissement dévié est trouvé. Fixer la valeur de ce paramètre est actuellement réalisé par ajustements successifs, c'est pourquoi une fois encore, on insiste sur le fait qu'il ne faut pas essayer de chercher dans le présent travail des valeurs absolues des grandeurs physiques de sorties, mais plus se focaliser sur l'analyse de la relation entre leurs valeurs et l'état de la microstructure numérique (semi-réaliste) créée.

3.5 CONCLUSION

L'objet de ce paragraphe est de montrer de façon qualitative les résultats issus d'une simulation DDD afin de fonder le travail plus formel réalisé dans les paragraphes suivants. On retient que cette étude permet de dégager deux catégories de dislocations, et que l'état de microstructure obtenu procure macroscopiquement un cycle mécanique d'aspect réaliste exhibant un écrouissage isotrope d'amplitude croissante et un écrouissage cinématique, dont la manifestation reste toutefois assez discrète.

4 DESCRIPTION GLOBALE DE L'ETAT DE LA MICROSTRUCTURE

La description qualitative « imagée » de la microstructure de dislocations fournie ci-dessus est inexploitable pour développer une modélisation mathématique macroscopique du comportement du monocristal. En effet, il est nécessaire d'extraire de cette microstructure un nombre restreint de paramètres qui décrivent malgré tout correctement l'état de cette microstructure et qui soient exploitables dans un modèle mathématique avec un nombre limité d'équations. Cette tâche d'extraction s'avère *déroutante*, l'état métastable de la microstructure de dislocations étant en cause. Une microstructure de dislocations présente une entropie de configuration très grande car pour une longueur de ligne de dislocations donnée, il existe de nombreuses configurations d'équilibre possibles. Décrire l'ensemble de la microstructure avec un seul paramètre n'est sans aucun doute pas suffisant.

La **densité de dislocations** est naturellement un paramètre d'état incontournable de la microstructure, mais au niveau *global* seulement. En effet, lorsqu'une microstructure présente une forte densité, *en moyenne*, le nombre et l'intensité des interactions entre dislocations sont plus importants puisque les dislocations sont nécessairement plus proches *en moyenne*. Le paramètre ne renseigne donc pas sur la grande variation des forces produites par les interactions qui induit localement des disparités dans le comportement des dislocations, ceci se répercutant notablement sur le comportement mécanique macroscopique. Ceci montre que la densité de dislocations n'est pas l'indicateur ad'hoc pour rendre compte de l'effet de la configuration spatiale des dislocations sur le comportement des matériaux.

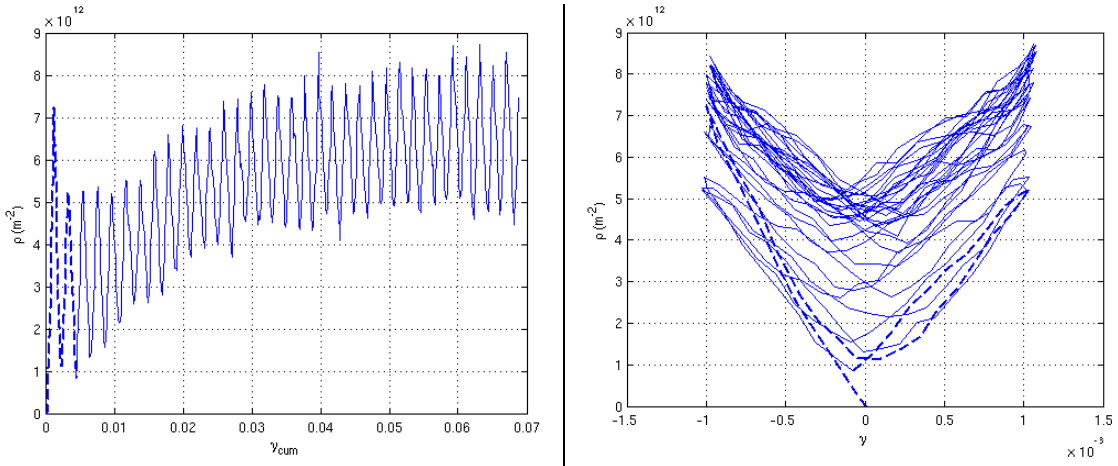
Différentes modélisations de l'évolution de la densité en fonction de la déformation sont proposées dans la littérature. Ces représentations qui sont souvent issues d'études en trajets de chargement monotones ont été le substrat pour le développement des premiers modèles de plasticité cristalline [**Cuitino** 96]. Très peu de connaissances sur l'évolution de ce paramètre en trajet de chargement cyclique existent toutefois.

Capter les fluctuations de la densité de dislocations lors de trajets alternés s'avère expérimentalement en effet beaucoup plus délicat. Toutefois, pour progresser dans la modélisation, il est nécessaire d'être en mesure de réaliser cela, ce qui représente le premier objectif de ce paragraphe.

Un second objectif est la mise en évidence du rôle important joué par les sous-structures de types dipôles dans la microstructure et de l'appréhender en s'intéressant à la distribution en taille de ces dipôles. La nature hétérogène en taille de ces sous-structures a donc une implication sous-jacente dans l'hétérogénéité de la déformation plastique qui règne dans la microstructure de dislocations. Ce travail est un pré requis au travail d'analyse des contraintes internes du paragraphe 5.

4.1 EVOLUTION DE LA DENSITE DE DISLOCATIONS

La simulation avec les effets de bords présentée au paragraphe précédent (§3) est analysée avec un outil numérique de comptage élémentaire, permettant de calculer la longueur totale de ligne de dislocations sur le système primaire $\frac{a}{2}[1\,1\,0](1\,\bar{1}\,\bar{1})$ et par suite de déterminer la densité[3] de dislocations. L'évolution de la densité est tracée ci-dessous, en fonction de la déformation plastique cumulée (figure 16(a)) ou en fonction de la déformation plastique (figure 16(b)).



(a) (b)

fig. 16 Evolution de la densité de dislocations en fonction de la déformation plastique cumulée (a) et de la déformation plastique (b).

Sur les deux figures le premier cycle est représenté en pointillé pour signifier qu'il s'agit d'un cycle préparatoire dans lequel la microstructure évolue d'un état confiné à un plan de glissement vers un état plus réaliste en bandes de glissement réparties dans le grain (voir aussi les commentaires du paragraphe 3.2). Il ne s'agit plus ici d'analyser ce cycle physiquement, comme pour le cas pour le cycle mécanique traité au paragraphe 3.2.

La figure 16(a) montre que la densité est une fonction globalement croissante mais qui subit à chaque cycle des fluctuations. Ces fluctuations ont déjà été relevées par plusieurs auteurs [**Polak** *et al.* 87]. Par exemple, Polak parvient à détecter la quasi-réversibilité de la production de dislocations à la saturation sur un essai cyclique par suivi de la résistivité du matériau. La mesure expérimentale des fluctuations à chaque cycle est cependant inaccessible par ces techniques car l'incertitude du moyen de mesures est

[3] Le passage de la longueur à la densité requiert la division par un volume. Le volume qui a été choisi est directement le volume du grain.

supérieure à l'amplitude de la fluctuation. La courbe de la figure 16(a) est donc la représentation graphique de la relation entre la densité de dislocations et la déformation cumulée. Les variations observées sont cohérentes avec la représentation imagée de la microstructure donnée au paragraphe 3.3, qui comporte :

- des dislocations qui s'accumulent d'un cycle à l'autre avec un taux qui diminue avec la déformation plastique cumulée,
- des dislocations qui apparaissent à chaque charge et disparaissent à chaque décharge, deux fois par cycle que l'on retrouve principalement empilées contre le joint de grain ou en quantité plus modeste enchevêtrées autour des dipôles (paragraphe 3.3).

Rappelons toutefois que l'observation de la microstructure nous indique que cette disparition n'est pas, au moins majoritairement, une annihilation au sens où on l'entend classiquement (deux dislocations de signes opposés se rencontrant ou se croisant dans des plans voisins), mais le fait d'un mécanisme de Frank-Read fonctionnant en sens contraire au sens habituel (résorbption de la boucle, voir § 3.3).

Le *premier type* est relatif aux dislocations responsables de l'augmentation globale de la densité ; il s'agit en grande partie de dipôles. Un outil de comptage de la densité de dipôles a été programmé à cet effet, pour détecter les dislocations de signes opposés en rapport à un instant t dans un rayon de coupure donné[4] et compter leur longueur : cela permet d'aboutir à l'évolution de la densité de dislocations impliquées dans la formation de dipôles et de la mettre en rapport avec la densité totale.

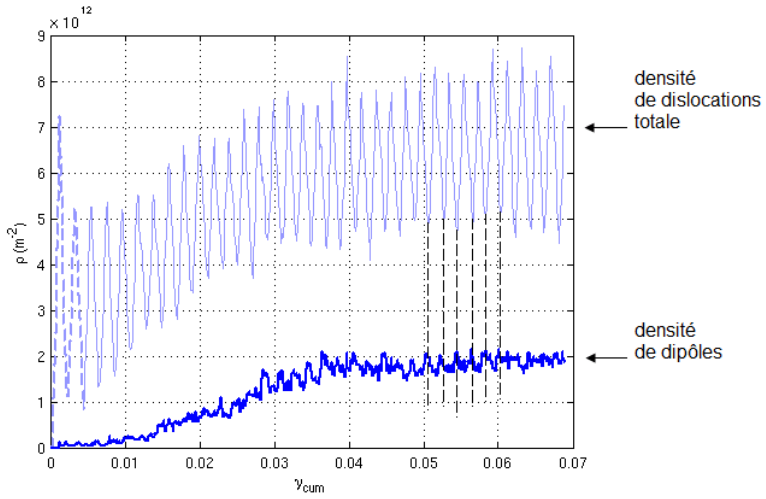


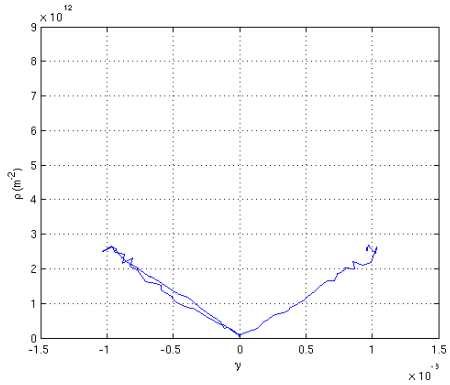
fig. 17 Evolution de la densité de dislocations impliquées dans la formation de dipôles dans la microstructure.

On remarque donc qu'environ 40 % des dislocations stockées le sont sous forme de dipôles. On note par ailleurs les légères fluctuations de la densité de dislocations impliquées dans la formation de dipôles, dont l'observation attentive révèle qu'elles présentent un déphasage d'environ 180° avec les fluctuations de la densité de dislocations totale : le maximum de densité de dipôles est en effet obtenu à déformation plastique nulle, lorsque le minimum local de la densité totale est atteint. Ceci s'explique facilement par le

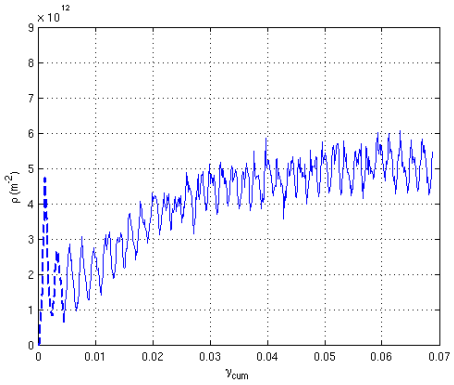
[4] Le rayon de coupure est pris égal à 100 nm : la résistance au croisement de deux dislocations constituant un dipôle de hauteur h étant donnée par $\frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)h}$, on qualifie ainsi de dipôle toute sous-structure opposant une résistance supérieure à 6 MPa (dans le cuivre).

fait que la déformation plastique accomodée par un dipôle est très faible, et donc que la façon la plus « naturelle » (au sens du minimum d'énergie stockée) pour la microstructure d'accommoder une déformation macroscopique imposée nulle est de s'organiser en dipôles. Il demeure toutefois 60 % de dislocations environ qui sont stockées autrement (et donc qui stockent plus d'énergie qu'un dipôle à effet égal), selon un mode précisé juste après.

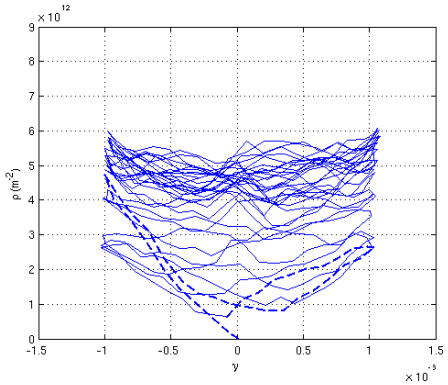
Concernant le *second type* de dislocations responsables des fluctuations de la densité il est instructif de déterminer la part de cette fluctuation produite par les dislocations empilées contre le joint de grain (dislocations qui nous intéressent peu), et celle qui est l'œuvre des dislocations s'accumulant temporairement autour des dipôles. De la même manière que l'on a retranché du cycle mécanique du grain DDD l'effet mécanique des dislocations s'empilant contre le joint de grain pour obtenir le cycle du monocristal (figure 14), les fluctuations de la densité de dislocations du monocristal s'obtiennent en retranchant aux fluctuations de la densité observées à la figure 16 les fluctuations engendrées par l'évolution en densité d'une microstructure fictive constituée de quatre plans de glissements au glissement dévié inhibé (voir simulation figure 13(b)). Le résultat est donné sur la figure 18.



(a) fluctuation de la densité de dislocations induite par une microstructure fictive constituée de 4 plans de glissements dans lesquels le mouvement des dislocations reste confiné, par inhibition forcée du glissement dévié. On montre facilement [**Déprés** 06] que $\rho = \frac{\gamma_p}{b.Dg}$, avec *Dg* la taille du grain.



(b) soustraction figure 16(a) – figure 18(a)



(c) soustraction figure 16(b) – figure 18(a)

fig. 18 Evolution de la densité de dislocations, pour le *monocristal*.

L'amplitude des fluctuations est de l'ordre de 10^{12} m^{-2}, soit environ 25 % de la densité accumulée (lors des derniers cycles simulés) : ce sont les dislocations qui s'empilent à chaque charge et décharge, autour des zones « dures » représentées par les dipôles. Elles sont qualifiées de géométriquement nécessaires car accommodant les incompatibilités de déformation plastique internes dans la microstructure. Elles sont en nombre relativement important et par leur nature polarisées (dislocations du même signe dans une même zone) jouent donc un rôle important dans la production des contraintes internes à longue distance et dans l'évolution de l'écrouissage cinématique dans le cycle. Notons par ailleurs que si leur densité fluctue d'environ 10^{12} m^{-2} à chaque cycle, il en subsiste une quantité non-négligeable à déformation plastique nulle (environ 60 % de la densité totale, en rapport avec les 40 % stockés sous forme dipolaire) : ce sont ces 60 % qui sont responsables de l'énergie stockée dans le matériau.

Pour terminer cette discussion et en vue de préparer l'élaboration d'une loi mathématique d'évolution de la densité de dislocations pertinente en conditions de chargement cyclique, on note la forme particulière de l'évolution de la densité de dislocations du monocristal en fonction de la déformation plastique (figure 18(c)). Comme cela est schématisé sur la figure ci-après, on remarque :

- la nature parabolique de l'évolution de ρ en fonction de γ_p, qui témoigne d'une production de densité de dislocations de la forme $\dot{\rho} = \frac{1}{b}\frac{\sqrt{\rho}}{K}\dot{\gamma}_p$, soit encore par intégration $\rho = \frac{1}{4b^2K^2}\gamma_p^2$,
- la modification de cette parabole due aux annihilations des dislocations de signes opposés est visible au début de la décharge et conduit à l'obtention d'un minimum qui n'est pas tout à fait obtenu à déformation plastique nulle.

La modélisation mathématique de cet effet est proposée dans le second chapitre.

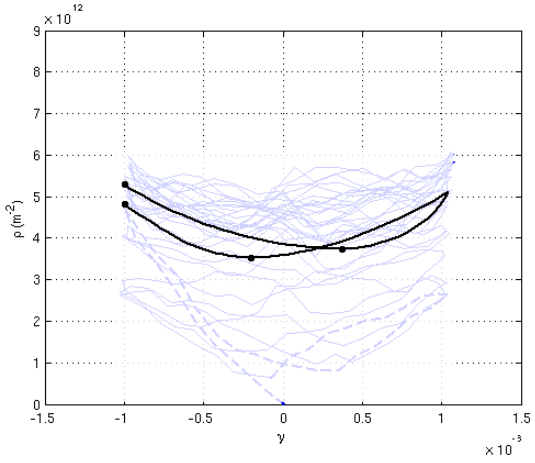
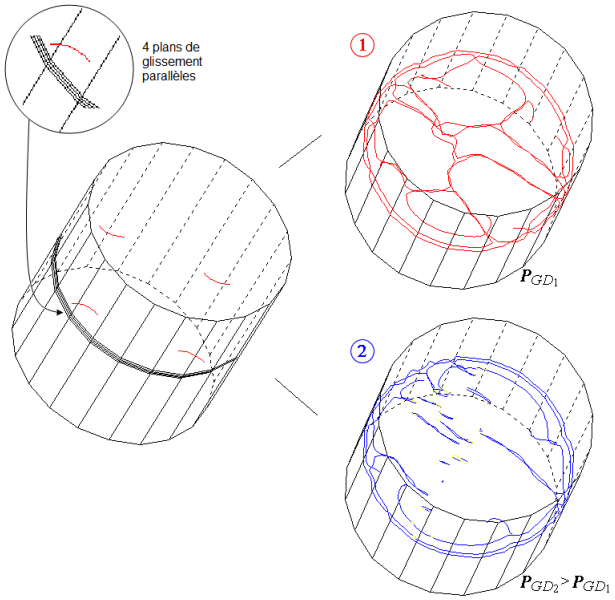


fig. 19 Schématisation sur *un cycle* de l'évolution de la densité de dislocations dans un monocristal.

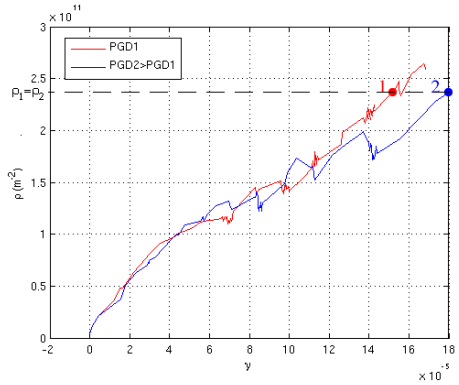
Ce paragraphe conduit à une meilleure représentation du paramètre densité de dislocations lors d'un chargement cyclique. Toutefois, comme il est précisé en introduction de ce paragraphe, la densité de dislocations donne une image incomplète de la microstructure car trop globale. Le paragraphe suivant est destiné à préciser cet aspect et à identifier dans la microstructure les spécificités locales qui risquent de jouer un rôle important.

4.2 INSUFFISANCE DE LA DENSITE DE DISLOCATIONS : VERS UNE DESCRIPTION LOCALE DE LA MICROSTRUCTURE

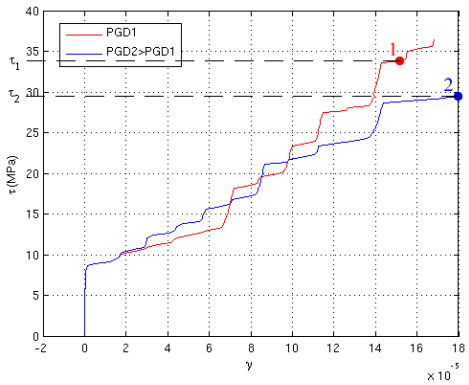
La densité de dislocations présente l'inconvénient d'être un paramètre global ne donnant aucune indication sur les configurations locales prises par les dislocations. Le propos est illustré par deux simulations purement démonstratives. 4 sources de Frank-Read ont été introduites dans un grain cylindrique, dans 4 plans voisins espacés de 6 nm. Dans la simulation n°1, la probabilité de glissement dévié $P_{GD}{}^1$ est artificiellement diminuée (l_0 grand dans la loi de probabilités), tandis que dans la simulation n°2, le glissement dévié est rendu très facile (l_0 petit dans la loi de probabilités) : on a $P_{GD}{}^2 > P_{GD}{}^1$. La figure 20(a) montre l'aspect de la microstructure à deux instants 1 et 2 repérés sur les courbes donnant l'évolution de la densité (figure 20(b)) et de la contrainte (figure 20(c)) en fonction de la déformation plastique cumulée. Ces deux instants sont tels que les densités ρ_1 et ρ_2 sont *identiques*.



(a) 4 sources de Frank-Read évoluant dans 4 plans parallèles distants de 6 nm. A densité égale, la microstructure présente des aspects différents en fonction de la probabilité d'activation du glissement dévié



(b) Evolution de la densité de dislocations pour deux probabilités de glissement dévié



(c) Evolution de la cission pour deux probabilités de glissement dévié

fig. 20 Simulation mettant en évidence que deux densités de dislocations identiques conduisent à des états de contrainte macroscopique différents, en fonction de la configuration spatiale adoptée par les dislocations.

A déformation plastique donnée, la densité est plus faible lorsque le glissement dévié est facile : ceci s'explique facilement puisque dans ce cas, les annihilations sont plus favorisées.

Réciproquement, à densité de dislocations donnée, la déformation plastique accommodée est donc plus importante lorsque le glissement dévié est activé : en effet, le mouvement des dislocations est moins entravé si les dislocations s'annihilent au lieu de faire des dipôles. La microstructure 2 présente effectivement moins de dipôles que la microstructure 1 (en tout cas, plus aucun dipôle de nature vis, qui se sont annihilés par glissement dévié). Par ailleurs, les dislocations qui font parties de dipôles dans la microstructure 1 se retrouvent dans la microstructure 2 empilées contre le joint de grain, et ont donc eu une « utilité » plus grande pour le glissement plastique puisqu'elles en ont accommodé une partie pour atteindre cette position.

Cette différence d'organisation de la microstructure, qui pourtant présente une densité identique, se traduit au niveau de la cission appliquée par une différence de 5 MPa : c'est l'effet direct de *durcissement* créé par les dipôles, qui bloquent le glissement plastique. Cette simulation met donc bien en évidence que l'utilisation directe de la densité de dislocations pour décrire la microstructure dans un modèle de plasticité cristalline est insuffisante, le lien entre cission appliquée et densité n'étant pas *biunivoque*. A cet égard, l'étude des dipôles en glissement simple est pertinente : c'est le but du paragraphe suivant.

4.3 EVOLUTION DES STRUCTURE DIPOLAIRES EN GLISSEMENT SIMPLE

Si le taux de production de dipôles suit globalement le taux de production de dislocations stockées (figure 17), il n'en reste pas moins que cette donnée seule est peu significative car on ne sait pas quelle résistance globale au glissement plastique cette densité génère. Par ailleurs, il est évident que cette résistance est la moyenne de résistances locales différentes puisque les dipôles créés n'ont que très peu de chance d'être identiques. Dans le but d'évaluer cette hétérogénéité, un tracé de l'évolution de la répartition en hauteur des dipôles dans la microstructure est proposé figure 21. On rappelle par ailleurs que la simulation DDD ne nous permet pas d'obtenir, avec un pas de réseau de 10*b*, un spectre continu des tailles mais un spectre discret d'un pas de 6 nm seulement.

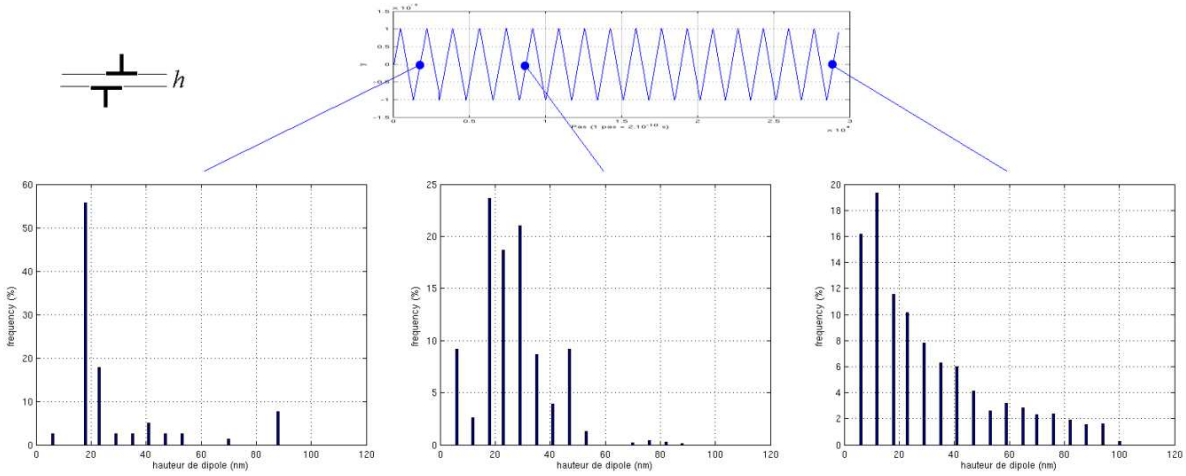
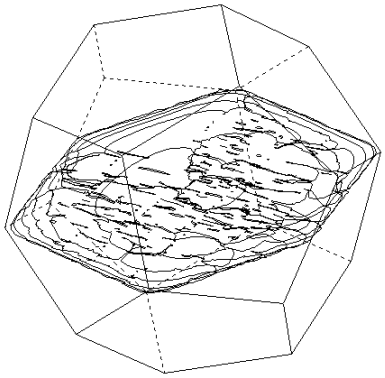


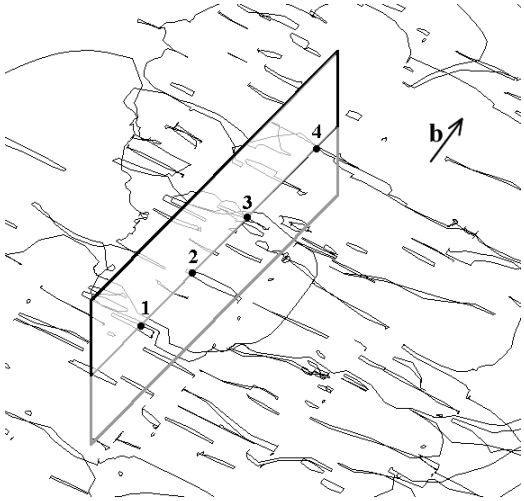
fig. 21 Répartition selon leur taille des dipôles (à caractère coin) dans la microstructure, à différents instants.

On met ainsi en évidence que les dipôles passent d'une répartition plutôt homogène en taille dans les premiers cycles à une répartition de plus en plus hétérogène (augmentation de l'écart type). La moyenne des hauteurs diminue très légèrement, traduisant des dipôles de plus en plus résistants globalement. Cette seule observation nous permet, sans autre démonstration, d'affirmer que la seule présence de ces dipôles sera suffisante pour créer de l'hétérogénéité de déformation plastique dans la microstructure puisqu'ils créent des noyaux de résistances hétérogènes aléatoirement répartis.

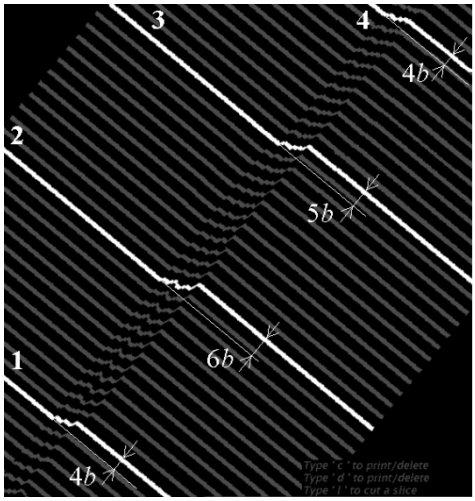
Cette hétérogénéité est mise en évidence visuellement grâce au développement d'un outil de calcul spécifique pour évaluer le déplacement du milieu continu induit par les dislocations qui y sont présentes [**Déprés** 08]. Le calcul présenté à la figure 22 montre le déplacement engendré par une bande de glissement sur un nuage de point plan pris perpendiculairement à la bande.



(a) Bande de glissement étudiée



(b) Zoom sur la microstructure et mise en place du plan de calcul des déplacements



(c) Champ de déplacement induit par la bande de glissement : les lignes 1, 2, 3 et 4 sont prises à la verticale des points repérés du même numéro sur la figure (b).

fig. 22 Mise en évidence de l'hétérogénéité de déformation induite par les dipôles dans une microstructure simple.

On remarque donc bien que dans l'environnement de chaque dipôle règne une déformation plastique différente. Par ailleurs, en observant bien la figure 22(b), on discerne les longues boucles de dislocations en appui contre les dipôles, qui accommodent l'incompatibilité de la déformation plastique le long de la bande.

Dans la littérature scientifique, il y a assez peu d'investigations sur la distribution statistique de hauteurs des dipôles de dislocations dans les monocristaux CFC. Toutefois, [**Hahner** *et al.* 98], [**Chiu** *et* **Vayssière** 08] et [**Mughrabi** *et* **Pschenitzka** 08] ont étudié l'existence et le rôle joué par les dipôles de dislocations dans les métaux CFC. De plus, [**Kassner** *et al.* 00, 01], et [**Catalao** *et al.* 05] ont respectivement analysé les distributions des dipôles dans le cas de monocristaux de cuivre et d'acier inoxydable AISI 316L. Ainsi, des études expérimentales [**Kassner** *et al.* 00] montrent que les microstructures de dislocations générées en fatigue sur des monocristaux de cuivre orientés en glissement simple se caractérisent entre autre par l'accumulation des dipôles de dislocations coins, sous forme des différentes structures : veines et canaux. La mesure des hauteurs des dipôles montre que leur hauteur moyenne et leur distribution est indépendante de leur position, étant égale tant dans les veines que dans les canaux, et ce dans une gamme de températures de 77 à 750 K. Une représentation schématique de la distribution des hauteurs des dipôles en fonction de leur densité, est présentée par [**Hahner** *et al.* 98]. Celle-ci se caractérise notamment par un spectre assez hétérogène, et une hauteur minimale des dipôles qui ne descend pas brusquement vers zéro, indiquant que l'annihilation n'est pas un processus spontanée mais thermiquement actif.

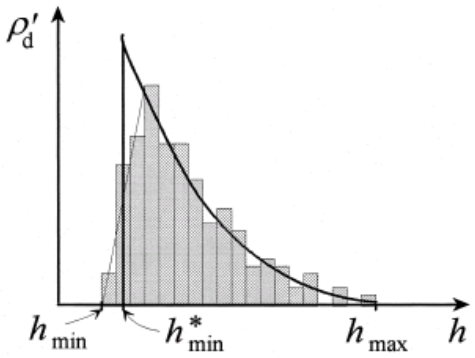


fig. 23 Distribution schématique des hauteurs des dipôles mesurée par [**Hahner** *et al.* 98].

En même temps, l'analyse par MET des polycristaux d'acier inoxydable AISI 316L [**Feaugas** 99], [**Catalao** *et al.* 05], met aussi en évidence le caractère dipolaire prononcé des microstructures de dislocations étudiées et donne une représentation des distributions des hauteurs des dipôles dans différents grains.

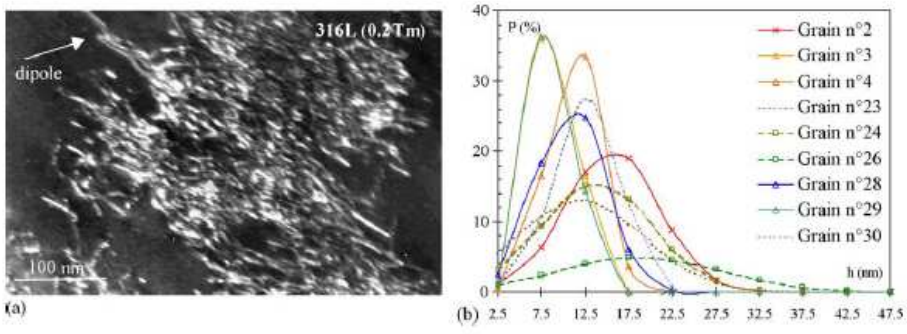


fig. 24 (a) Microstructure dipolaire dans un monocristal AISI 316L (b) Distributions des hauteurs des dipôles, pour différents grains ($\varepsilon_p = 10^{-3}$, T = 823 K) [**Catalao** *et al.* 05].

Cette étude montre bien que la répartition des hauteurs de dipôles peut être plus ou moins hétérogène en fonction des différents grains analysés. L'étude montre aussi que plus la hauteur moyenne des dipôles est faible, plus la répartition en hauteur est homogène, ce qui s'oppose quelque peu au constat fait

précédemment en DDD qui prédit l'inverse. Cette différence est toutefois à relativiser, car la méthode expérimentale d'identification d'un dipôle n'est pas forcement très fiable, tandis que le spectre trouvé en DDD est très discret.

4.4 CONCLUSION

La description globale de la microstructure nous a conduit successivement à nous intéresser à la densité de dislocations, puis à la catégoriser en une densité stockée et en une densité fluctuante à chaque cycle. Il est montré que ce seul paramètre est inapte à décrire les spécificités locales de la microstructure qui sont pourtant à l'origine même de l'hétérogénéité de la déformation plastique qui existe en son sein. En glissement simple, l'étude montre que les dipôles sont en nombre assez important, qu'ils représentent des obstacles au glissement plastique, avec un spectre de résistances qui n'est pas homogène au vu de l'éventail de valeurs que présentent les hauteurs relevées. Il est montré que de façon naturelle, cette hétérogénéité microstructurale génère une hétérogénéité de la déformation plastique, avec des implications sur les contraintes internes évidentes, contraintes qui sont finalement les seules responsables du comportement des dislocations et donc du comportement macroscopique. L'étude de ces contraintes est donc l'objet du paragraphe suivant.

5 DESCRIPTION LOCALE DE L'ETAT DE CONTRAINTE DANS LA MICROSTRUCTURE

Le comportement mécanique en plasticité par mouvements de dislocations d'un monocristal soumis à une cission appliquée résulte du comportement local de chaque segment de dislocations de longueur dl, qui se traduit mathématiquement par l'équation d'équilibre dynamique suivante :

$$\frac{0{,}5Gb}{R} + \tau - \frac{B}{b}v = 0$$

L'équation[5] lie la vitesse v du segment de dislocations à la cission locale effective τ appliquée sur ce segment, le terme $\frac{0{,}5Gb}{R}$ étant un terme dit de « tension de ligne » exprimant le surcoût de contrainte requis par l'augmentation de la longueur du segment quand celui-ci présente un rayon de courbure R. La cission locale appliquée sur le segment résulte de la cission appliquée τ_{app}, de la contrainte τ_{mic} induite par les autres dislocations dans la microstructure qui bien souvent (mais pas toujours) s'oppose à τ_{app}, et de la friction de réseau τ_0 :

$$\tau = \tau_{app} - \tau_{mic} - \tau_0$$

L'intérêt de citer cette formule est de montrer que si l'on souhaite obtenir le comportement macroscopique du monocristal, le seul travail à réaliser est finalement l'intégration de cette formule sur la longueur totale L de ligne de dislocations dans la microstructure. De façon évidente, pour effectuer

[5] Dans cette formule, G et B sont respectivement le module de cisaillement et un coefficient de « viscosité » traduisant l'interaction de la dislocation avec les phonons.

correctement ce travail d'intégration il faut disposer pour chaque segment de la valeur de la contrainte locale τ_{mic} et de la courbure locale $\frac{1}{R}$. En Dynamique des Dislocations Discrètes, le calcul de ces deux termes est fait systématiquement pour chaque segment, et le comportement macroscopique découle naturellement de l'utilisation de l'équation d'équilibre : le prix à payer est cependant un *traitement individuel* de chaque segment. En plasticité cristalline, le but est d'être efficace, et donc de parvenir à un *traitement global* de la microstructure de dislocations. **Un tel traitement est possible uniquement s'il existe une manière de décrire la microstructure non plus par la donnée de l'ensemble des segments individuels avec chacun leur contrainte locale, mais par groupes ou catégories de dislocations, chacun étant caractérisé par un état de contrainte donné qui induit le même comportement pour chacune des dislocations qui le constitue.**

Dans ce paragraphe, il s'agit de montrer que, au moins dans la gamme de densités simulée par DDD (c'est-à-dire assez faible), une telle catégorisation des dislocations par état de contrainte (et non plus par type de sous-structure du genre « dipôle » ou « dislocation longue s'accumulant » … catégorisation qui s'avère inexploitable mathématiquement) est possible. Ce point est le plus important du chapitre.

Cette catégorisation passe tout d'abord par le découpage classique de la contrainte locale vue par une dislocation : elle est la somme d'une contrainte dite à *courte* distance et d'une contrainte dite à *longue* distance. Le paragraphe suivant fait un point sur son calcul en DDD.

5.1 DEFINITION DES CONTRAINTES A *COURTE* ET A *LONGUE* DISTANCE

Ce découpage de la contrainte est naturellement réalisé depuis très longtemps [**Cottrel** 53], puisqu'il est finalement la réponse du métallurgiste qui observe au microscope les microstructures de dislocations au mécanicien qui observe des cycles mécaniques de fatigue macroscopiquement et parle d'écrouissage *isotrope* et d'écrouissage *cinématique*. Le mécanicien parle d'écrouissage isotrope lorsqu'il observe une résistance plus grande au glissement plastique sur le cycle, et d'écrouissage cinématique lorsqu'il observe des effets tels que l'effet Bauschinger qui est une aide au glissement plastique fournie par le matériau lui-même lors du changement de sens de chargement. Le métallurgiste parle quant à lui de contrainte à courte distance lorsqu'il observe deux dislocations évoluant sur des plans très voisins qui ne parviennent pas à se croiser lorsque leur rapprochement est minimal, et de contrainte à longue distance lorsqu'il observe une dislocation *isolée* faiblement mobile alors qu'un chargement extérieur est appliqué : une contrainte provenant de loin s'oppose nécessairement à la contrainte appliquée pour maintenir son équilibre.

Si ces deux langages se font écho, c'est bien que la microstructure présente :

- des dislocations qui se gênent globalement dans leur mouvement, produisant l'écrouissage isotrope (au travers de la contrainte à courte distance) ;
- des dislocations qui s'accumulent de façon polarisée (dislocations du même signe dans une même zone), créant des contraintes internes susceptible de s'opposer à la contrainte appliquée ou de l'aider si le sens de déformation s'inverse

Les dernières produisent quant à elles l'écrouissage cinématique (au travers de la contrainte à longue distance).

Si cette re-description ressemble à un enfoncement de porte ouverte, il n'en demeure pas moins qu'elle doit être perçue comme une étape permettant de catégoriser les dislocations en deux groupes, et donc d'aboutir à une première simplification conceptuelle dans la représentation d'une microstructure de dislocations : on distingue grossièrement le groupe des dislocations qui gênent le glissement plastique, et le groupe des dislocations qui accumulent de l'énergie interne et sont susceptibles de la restituer.

La difficulté pour exploiter ce premier niveau de représentation, qui rappelons-le existe depuis bien longtemps, réside en deux points jusqu'ici jamais réellement précisés et qui s'énoncent clairement :

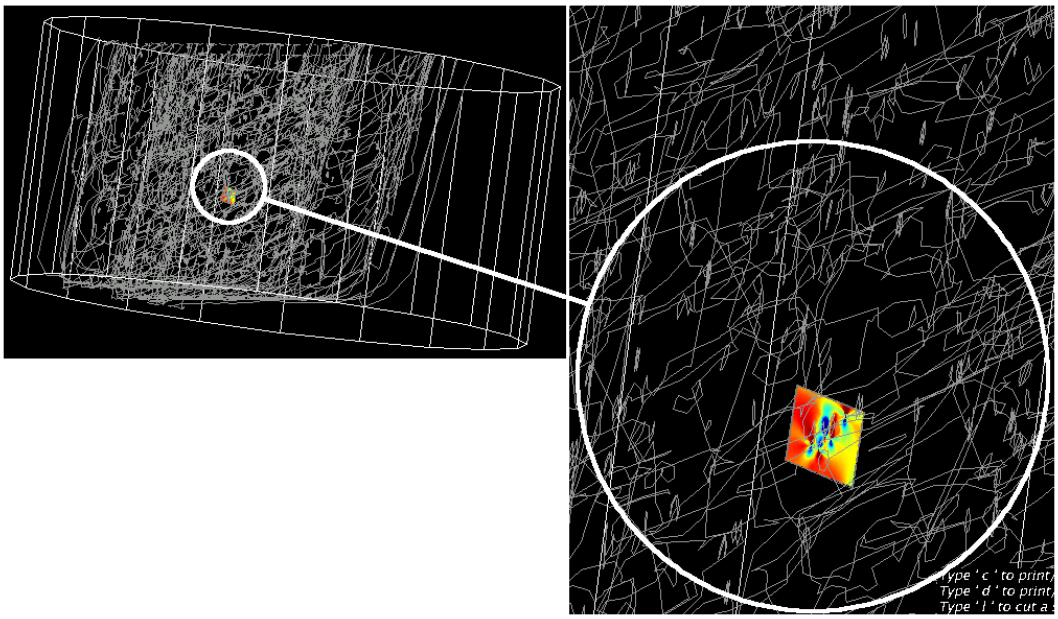
- les dislocations ne se gênent pas toutes avec la même intensité,
- il existe des interactions entre les deux types de dislocations, si bien que l'on ne peut pas vraiment dire, contrairement à la description un peu directe faite précédemment, qu'une dislocation est complètement dédiée à l'écrouissage isotrope et que sa voisine l'est à l'écrouissage cinématique, mais plutôt que chacune participe aux deux.

La Dynamique des Dislocations Discrètes apporte des réponses à ces deux points, dans la mesure où les contraintes à courte et à longue distance sont évaluables. Le champ de contrainte produit par un segment de dislocations en un point d'un milieu continu élastique linéaire étant connu [**François** *et al.* 91], il est possible de calculer en n'importe quel point la contrainte engendrée par une microstructure de dislocations constituée de segments discrets. Pour un segment donné, on accède à :

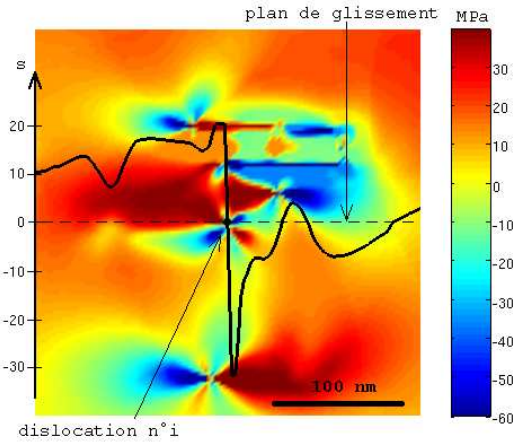
- la contrainte exercée par tous les segments présents dans son environnement proche défini par un certain rayon de coupure r_c, qui représente la contrainte à courte distance, conformément à l'observation d'interaction de « proximité » faite par le métallurgiste,
- la contrainte exercée par tous les autres segments, c'est-à-dire hors de la zone de proximité, qui exercent une contrainte à longue distance, par opposition à la précédente.

En illustration, on donne ci-après le calcul effectué sur un segment pris au hasard[6], numéroté *i*, dans la microstructure présentée au paragraphe 3, prise au cycle 17 à déformation maximale. La microstructure est constituée de 10000 segments. Le paramètre *s* désigne le champ de contrainte à courte distance autour de ce segment, et *X* son champ de contrainte à longue distance. Le rayon de coupure r_c, pour tous les calculs est égal à 150 nm. Ce rayon est choisi par rapport à la connaissance de la distance de déplacement la plus efficace d'un segment de dislocations sur un pas de temps (ici $\delta t = 2 \cdot 10^{-10}$ s) : c'est la distance couverte par une dislocation qui se déplacerait à vitesse maximale, c'est-à-dire la vitesse du son dans le matériau : 500 m/s. Une telle dislocation parcourt 100 nm sur un pas de temps. On considère donc que son mouvement peut sur un pas de temps, être influencé par les dislocations se trouvant dans une zone de même ordre de taille.

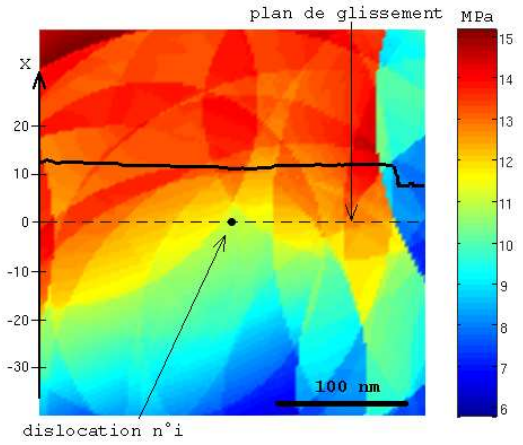
[6] On notera qu'il s'agit d'un segment à caractère coin.



(a) situation dans la microstructure du segment n°*i* sur lequel on calcule les contraintes à courte et à longue distance



(b) champ de contraintes à courte distance autour du segment n°*i* ; c'est le champ créé par les dislocations présentes dans un rayon de coupure r_c autour de la dislocation. La courbe superposée représente cette contrainte le long du plan de glissement : on remarque qu'elle présente un longueur d'onde faible.



(c) champ de contraintes à longue distance autour du segment n°*i* ; c'est le champ créé par les dislocations éloignées du segment. On prendra garde à l'échelle de couleur qui a tendance à trop souligner les variations qui demeurent faibles. La courbe superposée représente cette contrainte le long du plan de glissement : on remarque qu'elle présente une grande longueur d'onde.

fig. 25 Calcul des contraintes de cisaillement à courte et à longue distance autour d'une dislocation.

L'observation de ces deux champs de contraintes appelle différentes remarques.

- Le champ de contrainte à courte distance autour du segment se distingue par une longueur d'onde courte : si la dislocation veut se déplacer à partir de sa position actuelle, elle devra évoluer dans ce champ variable. Ce champ, en fonction de son amplitude plus ou moins grande, la place dans des puits de potentiels plus ou moins profonds, qui stabilise plus ou moins fortement sa position. On désignera alors LA contrainte à courte distance du segment n°i, notée s_i, par la moyenne suivante :

$$s_i = \frac{\left|\underset{M\in \text{plan de glissement}}{\text{Max}}(s_{(M)})\right| + \left|\underset{M\in \text{plan de glissement}}{\text{Min}}(s_{(M)})\right|}{2}$$

  qui finalement représente la contrainte locale maximale que la dislocation doit surmonter si elle veut bouger sur une distance importante (c'est-à-dire de l'ordre de la taille de la zone de coupure)[7]. En général, on a pu se rendre compte que |Max(s)| et |Min(s)| sont dans bien des cas à peu près égaux, ce qui « bloque » également dans un sens ou dans l'autre le mouvement de la dislocation.
- Le champ de contrainte à longue distance autour du segment se distingue par une longueur d'onde plus importante, ses variations sont faibles. Même si cela n'est pas visible sur la figure, c'est un champ qui varie lentement dans le temps, la microstructure éloignée changeant d'aspect et d'organisation que très lentement. A contrario, le champ à courte distance varie rapidement, les dislocations de l'environnement proche étant susceptible de changer de position rapidement. On désignera LA contrainte à longue distance du segment n°i, notée Xi, par la moyenne suivante :

$$X_i = \underset{M\in \text{plan de glissement}}{\text{Moy}}(X_{(M)})$$

On dispose alors d'un moyen de calcul puissant pour réaliser des statistiques sur ces deux champs, et de voir s'il se dégage des règles précises afin de catégoriser les dislocations. C'est le but des deux paragraphes suivants, en commençant par la contrainte à courte distance.

5.2 REPARTITION DES CONTRAINTES A COURTE DISTANCE

Dans un premier temps, on s'intéresse à la contrainte à courte distance qui règne dans la microstructure. En traçant la cartographie dans une bande de glissement ne représente pas grand intérêt. Celle-ci est toutefois fournie sur la figure 26. Le manque d'intérêt de ce tracé réside dans le fait qu'il importe peu de savoir en plasticité s'il y a de la contrainte en un point donné, *sauf si celui-ci présente des dislocations dans son environnement*, qui soient aptes à se déplacer ou non sous son action. Il est donc beaucoup plus pertinent de calculer cette contrainte non pas sur un nuage de points quelconque, mais au centre de chaque segment de dislocation constituant la microstructure, puis de représenter le résultat sous la forme d'un spectre de répartition.

[7] Techniquement parlant, le calcul effectué n'est pas aussi « parfait » que celui qui est présenté en illustration. On évalue en effet la valeur de la contrainte à courte distance en seulement 12 points également répartis sur le plan de glissement entre $+r_c$ et $-r_c$ autour de la dislocation, et on en prend le maximum et le minimum. On notera que sur une microstructure constituée de 10000 segments, obtenir pour chaque dislocation le champ à courte distance et à longue distance requiert : 10000×10000×12×2 calculs, ce qui s'avère vite très long.

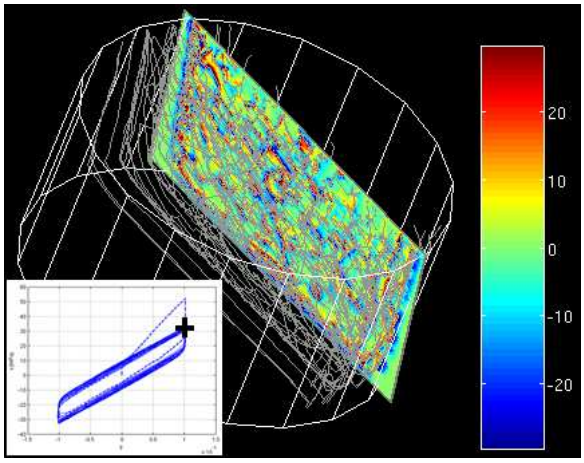


fig. 26 Cartographie des contraintes à courte distance dans une bande de glissement (en MPa). On observe un champ variable à faible longueur d'onde, avec des pics de l'ordre de 100 MPa. Ce tracé manque d'intérêt cependant, car pas exploitable.

La figure 27 présente le principe du tracé de ce résultat, au cycle n°17 de la simulation présentée au paragraphe 3 : en abscisse on place les contraintes à courte distance possibles (noté s), et en ordonnée on place la probabilité qu'à la dislocation n°i d'avoir sa contrainte à courte distance s_i comprise entre s et $s+\Delta s$:

$$P(s) = P(s \leq s_i \leq s+\Delta s) = \frac{\sum_{i \,/\, s_i \in [s,s+\Delta s]} \mathrm{d}l_i}{L}$$

Techniquement, $P(s)$ est calculée comme étant le rapport de la somme des longueurs $\mathrm{d}l_i$ des segments dont la contrainte à courte distance est comprise entre s et $s+\Delta s$, et la longueur totale de dislocations L. La figure 27 montre que, au moment où est observée la microstructure, celle-ci présente un nombre important de dislocations soumises à une contrainte à courte distance faible (ce sont les dislocations longues que l'on avait décrite au paragraphe 3.3 : elles ne présentent que des voisins assez éloignés).

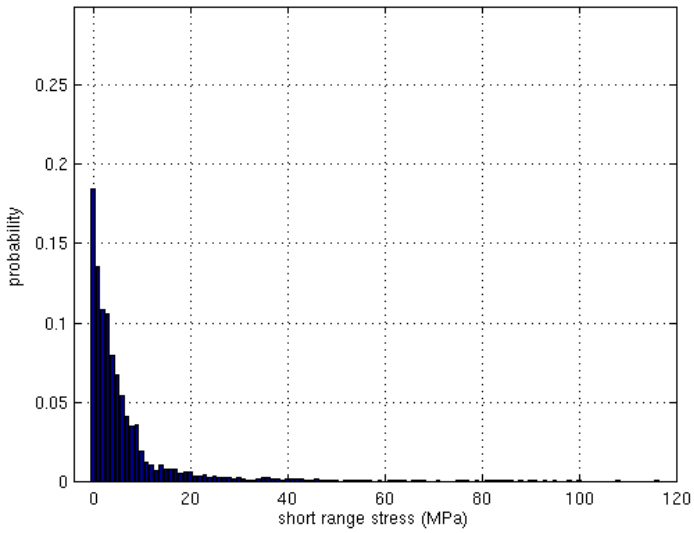


fig. 27 Spectre de répartition des contraintes à courte distance sur les dislocations. Ici, Δs = 1 MPa.

On remarque aussi que les groupes de dislocations ayant une contrainte à courte distance plus importante sont de plus en plus réduits, d'autant plus que cette contrainte est grande : on ne trouvera ainsi qu'un très faible pourcentage de dislocations ayant des contraintes à courte distance supérieures à 40 MPa.

L'intérêt d'un tel tracé réside dans le fait que l'on peut observer l'évolution du spectre au fur et à mesure de l'évolution de la microstructure. L'observation de la figure 28 révèle que :

- Au cours des premiers cycles, la microstructure de dislocations est plutôt homogène, au sens que les dislocations subissent à peu près toutes une contrainte à courte distance faible (entre 0 MPa et 10MPa). Ceci s'explique facilement par le fait que, au début de la déformation plastique, la densité de dislocations est relativement faible, les dislocations sont donc plutôt éloignées les unes des autres, ne se « voient » donc presque pas, et ne se gênent donc que très peu.
- Au fur et à mesure que la déformation plastique cumulée augmente, la microstructure devient plus *résistante* au glissement plastique, et dans le même temps plus *hétérogène* : en effet, la moyenne de la distribution (notée `smoy`) augmente, et son écart-type (noté `sstd`) augmente aussi. L'explication physique est la même : on trouve dans la microstructure de plus en plus de dislocations, les interactions à courte distance augmentent (dipôles), avec un éventail d'amplitudes de plus en plus large, en accord avec le spectre de répartition des hauteurs de dipôles présenté à la figure 21.
- Enfin, on notera que sur un cycle cette répartition ne varie que très peu : en observant la répartition en deux points du dernier cycle sur la figure 28, on constate que la distribution est sensiblement la même à déformation plastique imposée nulle et à déformation plastique imposée maximale.

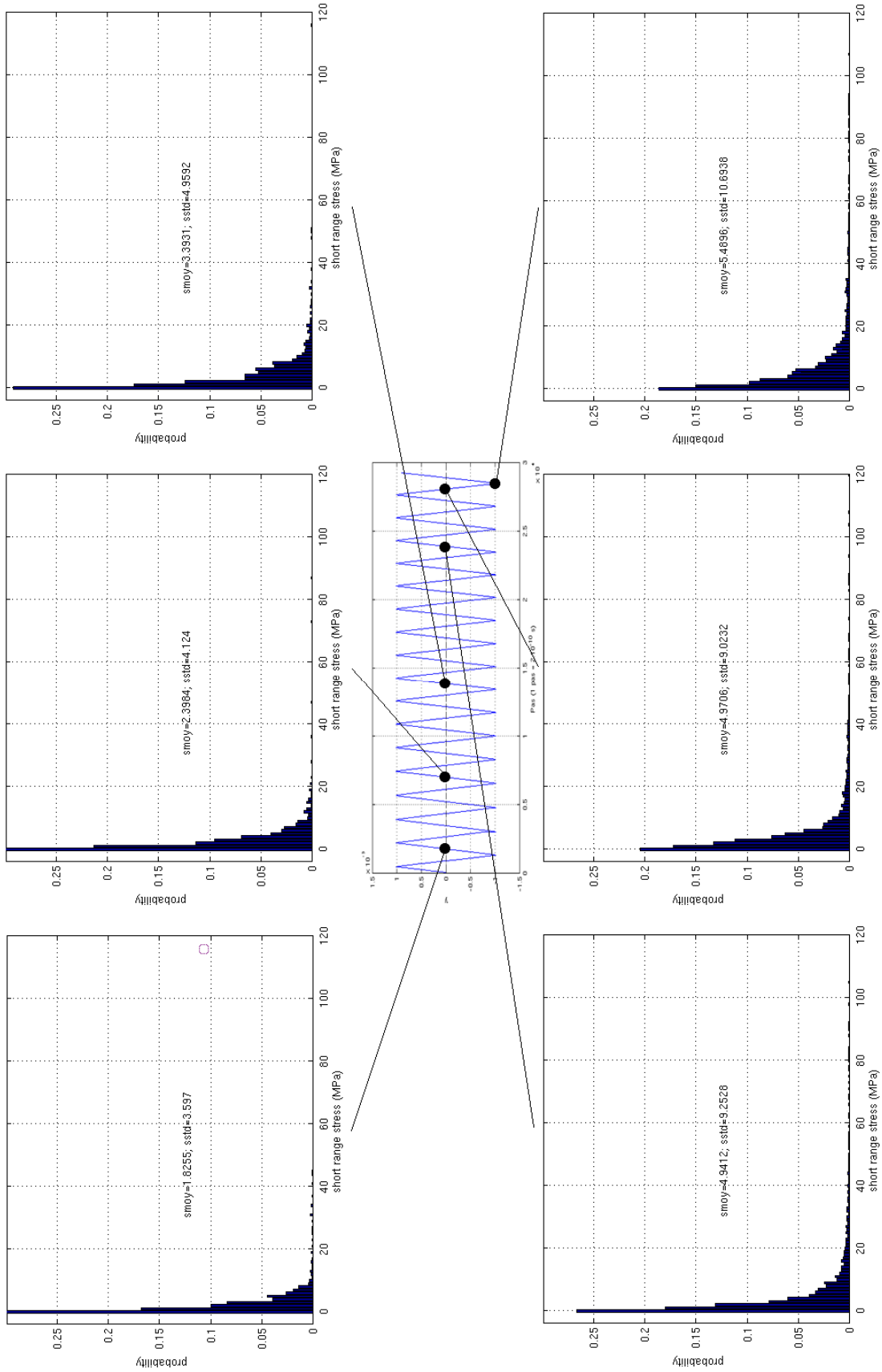


fig. 28 Evolution du spectre de distribution des contraintes à courte distance. **Notations** : `smoy` représente ici la contrainte moyenne de la distribution, `sstd` représente son écart-type.

D'un point de vue mathématique, on constate que la distribution est continue, que *sa moyenne est sensiblement égale à son écart-type*, et donc que l'on peut chercher l'expression d'une densité de probabilité $f(s)$ qui modéliserait correctement cette distribution :

$$f(s) = \lim_{\Delta s \to 0} \frac{P(s)}{\Delta s}$$

Cette distribution semble correspondre à une distribution connue, la *distribution exponentielle*, qui s'exprime par :

$$f(s) = \frac{1}{\bar{s}} \exp\left(-\frac{s}{\bar{s}}\right)$$

en notant $\bar{s}$ la moyenne de la variable aléatoire s. La représentation de cette fonction est fournie sur la figure 29 superposée au spectre trouvé en DDD. Cette densité de probabilité s'adapte bien à celle trouvée en DDD, elle se caractérise d'ailleurs par l'égalité de sa moyenne et de son écart-type.

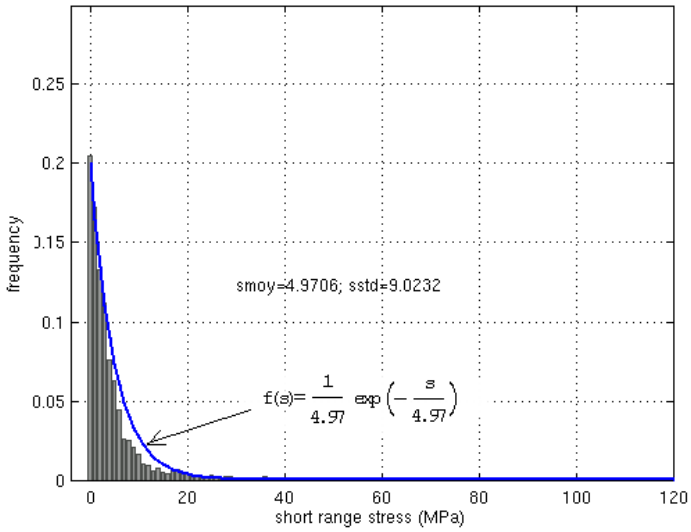


fig. 29 Adaptation de la distribution exponentielle au spectre trouvé en DDD.

Pour terminer, on remarque qu'il est aussi possible de lier la moyenne de la distribution en contraintes à courte distance à la densité de dislocations ρ de la microstructure. D'un point de vue physique, ce lien est intuitif : il s'exprime simplement par le fait que plus la densité est grande, plus les dislocations sont proches et interagissent à courte distance. Le graphe de la figure 30 montre qu'il existe une relation linéaire entre les logarithmes des deux grandeurs, avec une pente de ½.

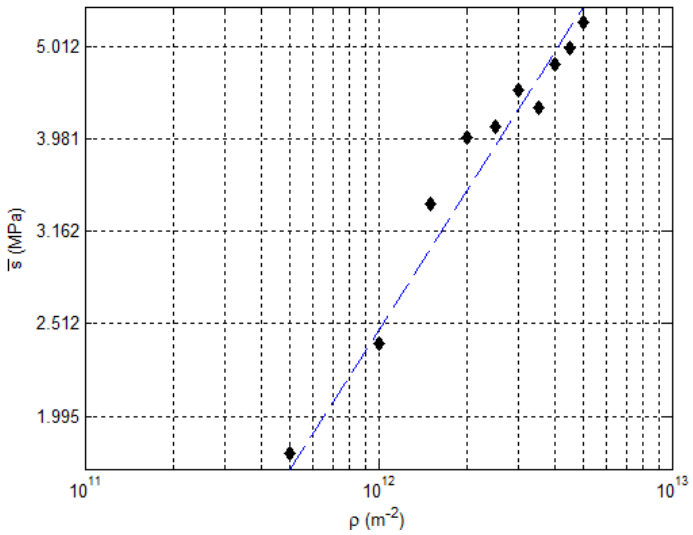


fig. 30 Lien (*log-log*) entre la moyenne de la distribution $\bar{s}$ et la densité de dislocations ρ. Les points noirs sont issus de l'étude DDD, la droite en pointillé est la meilleure approximation linéaire du nuage de point.

Plus précisément, la relation, que l'on peut aussi dénommer *loi d'état* puisqu'elle lie des paramètres d'états caractérisant la microstructure, peut s'exprimer suivant une forme classique, rappelant celle donnée par Kocks & Mecking [**Kocks** *and* **Mecking** 03] :

$$\bar{s} = \alpha \mu b \sqrt{\rho}$$

avec les constantes prenant ici les valeurs suivantes :

μ : module de cisaillement	45000 MPa (cuivre)
b : norme du vecteur de Burgers	$0{,}25 \cdot 10^{-9}$ m (cuivre)
α : coefficient adimensionnel	0,22

On retrouve donc ainsi un résultat classique, exprimant que la résistance moyenne de la microstructure est liée à sa densité. Généralement, le coefficient α est mesuré ayant une valeur plutôt de l'ordre de 0,35. La valeur plus faible trouvée dans cette étude s'explique par le fait que, pour les raisons liées à la discrétisation temporelle et spatiale (voir paragraphe 2.2), la microstructure DDD ne « résiste » pas autant qu'elle ne le devrait.

Dressons à présent le **bilan** de l'étude présentée dans ce paragraphe : les résultats trouvés revêtent en effet un caractère particulièrement important. L'étude montre qu'il est possible de donner une description mathématique de la microstructure plus riche que ce qui ne se faisait jusqu'à présent. La microstructure est désormais décrite par la donnée de :

- son état *global*, au travers du paramètre densité ρ,
- son état *local*, par nature hétérogène, au travers de la classification des dislocations par contrainte à courte distance, suivant une densité de distribution $f(s)$connue (loi exponentielle).

La densité de distribution n'est pas quelconque : sa moyenne et son écart-type sont en effet entièrement déterminés par une loi d'état qui les lient à ρ. Pour spécifier cette dépendance à ρ, on note $f(s) = f_\rho(s)$.

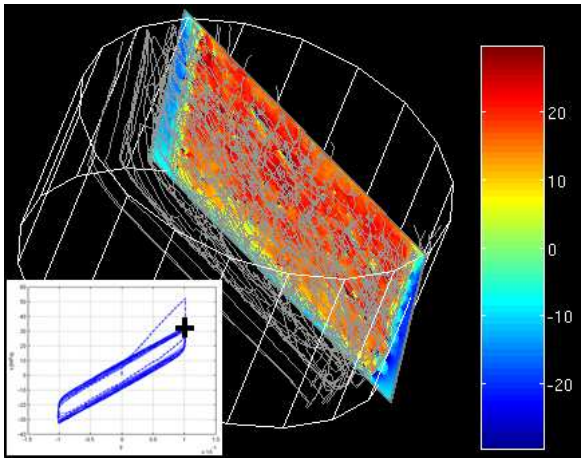
Cette manière de décrire la microstructure ouvre des perspectives intéressantes pour tout modèle mathématique établi dans le but de décrire le comportement plastique macroscopique à partir de l'état microscopique de la structure de dislocations, puisqu'il introduit mathématiquement la notion d'hétérogénéité de la microstructure. On sait désormais que, pour une microstructure de densité de dislocations donnée, il existe une répartition bien précise de segments de dislocations ayant localement une contrainte à courte distance donnée, c'est-à-dire un niveau de résistance à son mouvement donné. Toutefois, le problème n'est bouclé que si l'on connaît également, pour chaque dislocation, son niveau de contrainte à longue distance : c'est en effet avec la connaissance de l'état de contrainte total (*courte* + *longue* distance) que l'on peut prédire le mouvement d'une dislocation.

5.3 REPARTITION DES CONTRAINTES A LONGUE DISTANCE

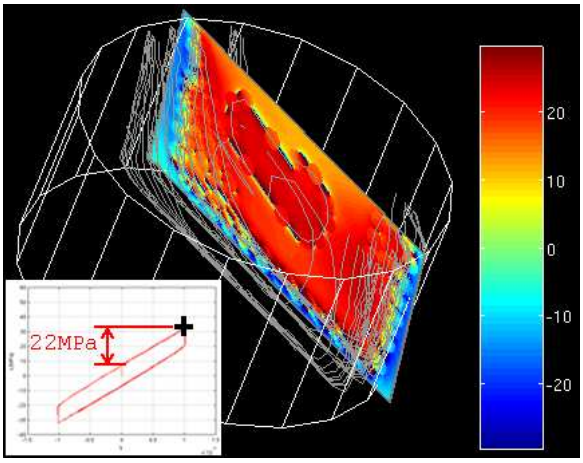
S'il est possible de classer les dislocations par contrainte à courte distance (voir paragraphe précédent), la question est désormais de savoir si pour chacun des groupes, la contrainte à longue distance est déterminée de façon univoque (auquel cas le comportement de toutes les dislocations du groupe est connu) ou si elle est variable de façon aléatoire (auquel cas la représentation fournie ci-dessus n'est pas d'un grand intérêt, car des dislocations du même groupe se comporteront différemment). Ce paragraphe s'articule sensiblement de la même manière que le paragraphe précédent :

- tracé de la cartographie des contraintes à longue distance,
- calcul des contraintes à longue distance au centre des segments, et analyse de la distribution.

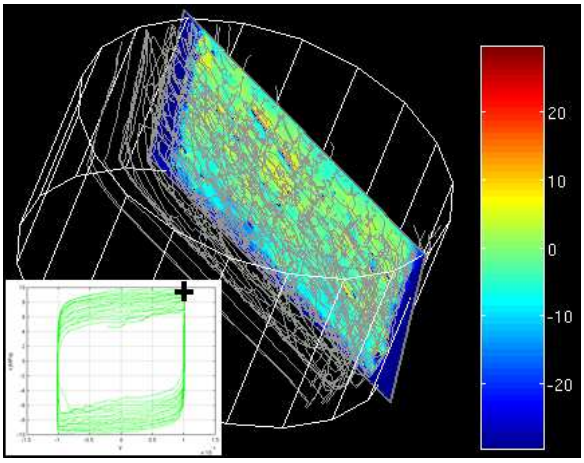
De même que l'on trace la cartographie de la contrainte à courte distance (figure 26), on trace celle de la contrainte à longue distance (voir figure 31(a)) au sein d'une bande de glissement. Ce tracé reste toujours sans intérêt direct pour les mêmes raisons que celles évoquées ci-dessus pour la contrainte à courte distance. Toutefois, il nous permet ici de préciser certaines notions utiles pour la suite. On distingue sur la figure 31(a) le champ de contraintes à longue distance créé par toute la microstructure : la couleur rouge indique qu'il règne dans la microstructure une contrainte de l'ordre de 20 MPa. Ce champ est créé par toutes les dislocations, en particulier par les dislocations s'empilant contre le joint de grain, qui, comme on l'a vu au paragraphe 3 pour expliquer le fort effet Bauschinger, masquent l'effet propre du reste de la microstructure. Il suffit pour s'en convaincre de tracer, sur la figure 31(b), le champ induit par une microstructure de type empilement (celle de la figure 13(b)) accommodant la même déformation plastique : l'effet est plutôt uniforme à l'intérieur de l'empilement, il est de l'ordre de 20 MPa et c'est précisément la valeur lue sur le cycle mécanique associé. Par conséquent, il est possible d'obtenir, en retranchant le champ de la figure 31(b) à celui de la figure 31(a) d'obtenir le champ de contrainte à longue distance qui règnerait dans la microstructure d'un monocristal, figure 31(c). On remarque que ce champ est variable entre environ +10 et -10 MPa avec une longueur d'onde relativement faible : ce sont les seuls conclusions que ce type de tracé permet de fournir.



(a) champ de contrainte à longue distance de la microstructure complète. L'effet des dislocations d'empilement y est grand, comme en témoigne la figure 31(b)



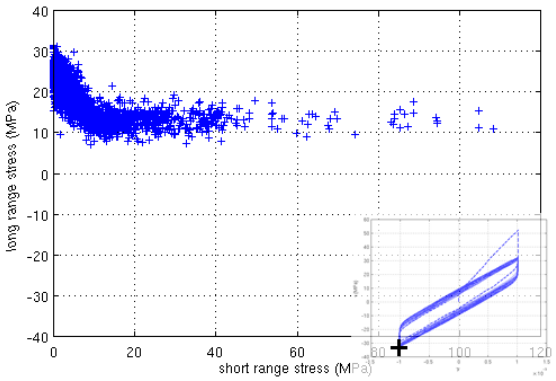
(b) champ de contrainte à longue distance produit par une microstructure fictive constituée de 4 plans de glissements dans lesquels le mouvement des dislocations reste confiné par inhibition forcée du glissement dévié. Il est quasi uniforme à l'intérieur de l'empilement.



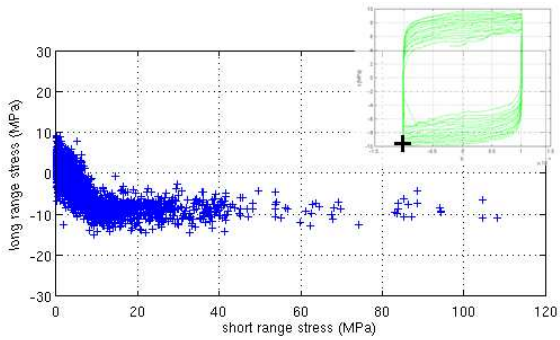
(c) champ de contrainte à longue distance induit par la microstructure, *hors effet* produit la les dislocations empilées contre le joint de grain. C'est le champ de contrainte à longue distance du monocristal.

fig. 31 Champ de contrainte à longue distance dans une bande de glissement (en MPa).

Pour exploiter plus les données issues de la DDD, la contrainte à longue distance est considérée uniquement au centre des segments de dislocations, en suivant le schéma de pensée du paragraphe précédent : en plasticité, connaître la contrainte en un point n'est intéressant que si une dislocation est présente en ce point. Par ailleurs, on se focalise directement sur l'existence d'un lien possible entre contrainte à courte distance et contrainte à longue distance s'appliquant sur un segment, en représentant sur un même graphe (figure 32(a) et (b)) ces deux variables. On s'intéressera surtout au graphe 32(b), sur lequel l'effet des dislocations d'empilement a été retiré d'autorité par une translation de 20 MPa du tracé originel figure 32(a) (toutes les dislocations étant soumises à l'effet de l'empilement, voir figure 31(b)). Notons que le tracé est effectué pour la microstructure soumise à la déformation plastique imposée maximale au dernier cycle (voir croix sur le cycle) : une contrainte d'environ -10 MPa est appliquée sur le monocristal.



(a) tracé direct



(b) tracé translaté de 20 MPa, pour déconvoluer l'effet des dislocations

fig. 32 Graphe {contrainte à courte distance — contrainte à longue distance}. Chaque point représente l'état de contrainte d'une dislocation : l'abscisse du point n°*i* est la contrainte à courte distance s_i vue par la dislocation n°*i*, et son ordonnée est sa contrainte à longue distance X_i.

La représentation {contrainte à courte distance — contrainte à longue distance} ci-dessus montre directement qu'il semble exister un lien entre les deux composantes de la contrainte, même si le nuage de points est diffus d'une dizaine de MPa : pour une contrainte à courte distance donnée, il existe une contrainte à longue distance associée à peu près déterminée.

Cela signifie plus directement que désormais, un segment de dislocation ne doit plus être considéré comme un individu *unique*, avec sa propre contrainte et son propre comportement ; il pourra en effet être considéré comme appartement à une *classe d'individus*, qui s'identifie par son niveau de contrainte à courte distance. *Tout segment de dislocation appartenant à cette classe aura alors un niveau de contrainte à longue distance déterminé à peu près identique à ses semblables de la même classe, et par suite adoptera un comportement identique*. En suivant ce principe, on constate que l'on a une représentation vraiment simplifiée et clarifiée de la microstructure, puisqu'elle est décrite par groupe de dislocations de proportion connue et de comportement connu.

Pour se convaincre de l'uniformité de comportement des dislocations appartenant à un groupe identifié par sa contrainte à courte distance, un calcul original a été effectué. A trois moments de la décharge, le champ des vitesses moyen des dislocations de chaque classe a été évalué pour trois incréments de cission appliquée identiques $\Delta\tau$ = 0,2 MPa. En raison des limites liées aux discrétisation spatiales et temporelles indiquées au paragraphe 2, le calcul est le résultat d'une moyenne des vitesses effectuée sur plusieurs pas (environ 50 pas en moyenne sont nécessaires pour que la microstructure soit de nouveau à l'équilibre après un incrément de cission appliquée de 0,2 MPa)[8]. Le résultat est tracé sur la figure 33, sur un graphe à 3 dimensions, qui rappelle le classement des dislocations par contrainte à courte distance sur les axes *horizontaux*, et donne sur l'axe *vertical* la vitesse moyenne des segments appartenant à un groupe de contrainte à courte distance donné.

[8] A cause des discrétisations spatiales et temporelles, un segment de dislocation à priori bloqué peut osciller à chaque pas à grande vitesses entre deux positions proches de la position d'équilibre idéale (voir paragraphe 2.2). Globalement, le mécanisme n'engendre pas de déformation plastique sur plusieurs pas, mais en engendre sur un seul pas. C'est pourquoi une estimation des vitesses sur plusieurs pas est nécessaire.

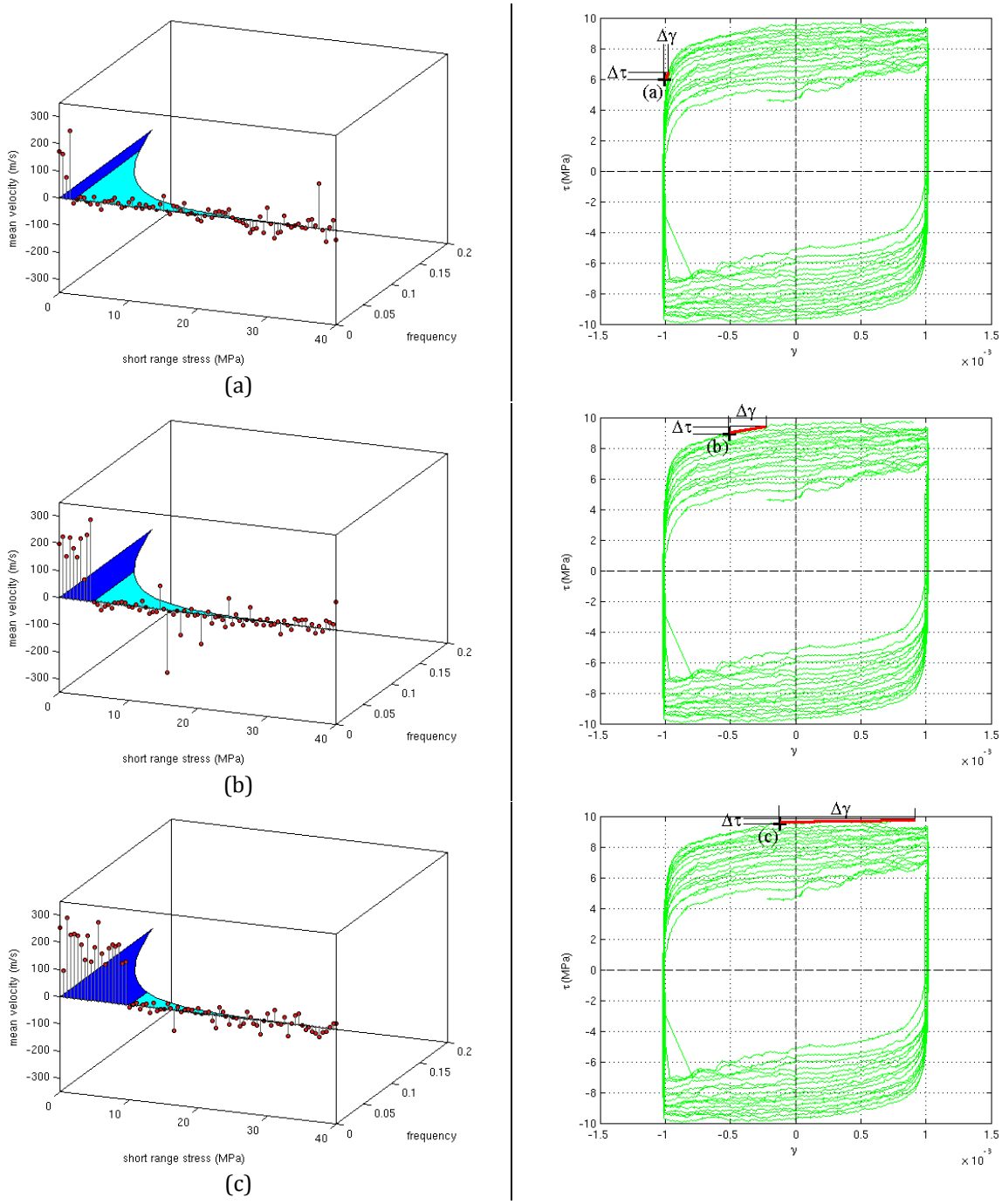


fig. 33 Vitesses des dislocations en fonction de leur contrainte à courte distance (graphes 3D à gauche) données à 3 instants du cycle (cycles de droites).

On remarque que :

- au début de la charge (a), seules les dislocations dont la contrainte à courte distance est faible bougent sous l'effet de $\Delta\tau$. Leur proportion étant très faible (proportion évaluée en bleu foncé), l'effet du déplacement de ces dislocations n'engendre qu'un incrément de déformation plastique $\Delta\gamma$ très faible, d'où un fort module d'écrouissage.
- un peu plus tard dans la charge (b), d'autres dislocations, avec des contraintes à courte distance de plus en plus fortes, se mettent en mouvement. La proportion de dislocations mobiles augmente, l'incrément de contrainte $\Delta\tau$ engendre donc un incrément de déformation $\Delta\gamma$ plus fort, d'où un module d'écrouissage diminuant.

- enfin encore plus tard (c), presque toutes les dislocations parviennent à se mettre en mouvement, ce qui engendre un module d'écrouissage presque nul.

Ce comportement collectif des dislocations peut aussi être suivi sur le graphe {contrainte à courte distance — contrainte à longue distance}, en observant l'évolution de son allure à différents instants du cycle (figure 34). Cette figure met en évidence :

- les dislocations qui sont mobiles, en nombre croissant au fur et à mesure de la charge
- l'existence d'un « seuil » de contrainte à courte distance s_{lim}, évolutif en fonction du point de charge, au-delà duquel les dislocations ne sont plus mobiles,
- l'expression simplissime d'une loi de comportement pour les dislocations, qui exprime que le mouvement de la dislocation n°i est possible si :

$$-\tau_{app} \geq s_i + X_i + \text{sign}(\dot{\gamma})\,\tau_0 \text{ , soit encore : } X_i \leq -s_i - \tau_{app} - \text{sign}(\dot{\gamma})\,\tau_0$$

Ce paragraphe se terminera par un bilan des résultats présentés dans les paragraphes 5.2 et 5.3, sur lesquels il semble important d'insister car ils constituent un point clé dans la représentation que l'on peut avoir d'une microstructure de dislocations.

Il a été montré au paragraphe 5.2 qu'un segment de dislocation (numéroté i) d'une microstructure de densité ρ donnée, peut être classé avec d'autres segments selon leur niveau de contrainte à courte distance s. La représentativité de chaque classe $\mathcal{C}$ dans la microstructure est donnée par une fonction de probabilité $f_\rho(s)$ connue (loi exponentielle), évolutive et dépendante de la densité ρ.

$$\mathcal{C}_s = \{i \,/\, s_i \in [s\,;\, s+\Delta s]\}$$

$$\text{card}(\mathcal{C}_s) = f_\rho(s)\cdot\Delta s$$

Il a été ensuite montré au paragraphe 5.3 qu'il existe un lien univoque entre la contrainte à courte distance s_i du segment et sa contrainte à longue distance X_i , selon une fonctionnelle χ indépendante de i :

$$X_i = \chi(i,s_i) = \chi(s_i)$$

Ceci implique que ce segment de dislocation adopte un comportement qui est le même que tous les autres segments de sa classe, puisque tous ces segments sont dans le même état de contrainte (à courte et longue distance) :

$$X_i = \chi(s_i) = \chi(s) = X(s)$$

Au final, on voit donc qu'un segment de dislocation perd son caractère d'individu unique, et que la microstructure est non plus décrite par la collection de tous les individus, mais par la collection de toutes les classes d'individus, caractérisées par un comportement et une représentativité connus (liés à la densité). On diminue de cette manière drastiquement la taille du problème, en passant de la gestion d'individus (en DDD) à la gestion de groupes d'individus (ce sera l'objet de la modélisation en plasticité cristalline dans le chapitre 2). Cette technique permet par ailleurs, en réglant le seuil Δs d'acceptation dans une classe de niveau s donné, de moduler la taille du problème en modulant le nombre de groupes représentatifs de la microstructure, c'est-à-dire en modulant à souhait le niveau de grossièreté de la description.

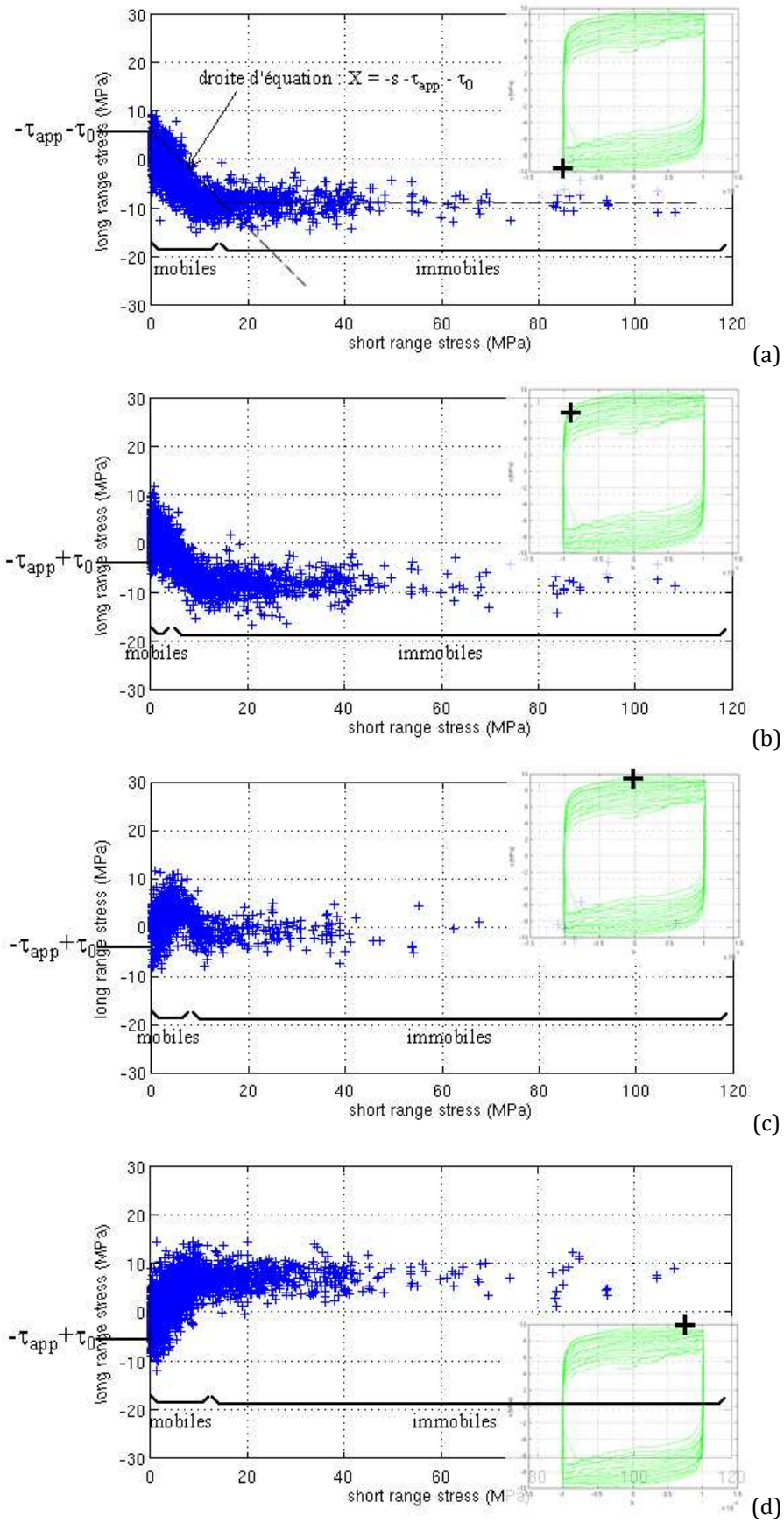


fig. 34 Evolution du graphe {contrainte à courte distance - contrainte à longue distance} au cours du temps.

5.4 DISCUSSION

Les résultats présentés aux paragraphes 5.2 et 5.3 donnent lieu à des remarques importantes. Celles-ci sont inhérentes à l'outil Dynamiques des Dislocations qui nous a servi à les démontrer. En effet, il faut garder présent à l'esprit que les microstructures qui sont créées ici de façon numérique avec pour vocation de reproduire au mieux ce qui pourrait se passer en réalité, souffre des artéfacts liés à la méthode de calcul. Outre ceux liés à la discrétisation (paragraphe 2), on se focalisera surtout sur le fait que les densités reproduites restent ici relativement faibles puisque correspondantes à des déformations plastiques cumulées assez faibles. De ce constat naît alors deux mises en garde :

- la répartition des dislocations par groupes distincts reconnaissables par le niveau de contrainte à courte distance des dislocations les constituant est visiblement donnée suivant une loi de distribution bien précise évoluant dans le temps (figure 28). La question de savoir si le résultat peut être extrapolé vers des densités de dislocations plus grandes reste ouverte : en effet, l'analyse expérimentale des microstructures de dislocations à forte densité montre habituellement la formation de microstructures de caractère marqué [**Peralta** 08] ; elles présentent non plus de légers enchevêtrements de dislocations comme on a pu le simuler en DDD, mais de véritables sous-structures de hautes et faibles densités de dislocations qui cohabitent, réputées sous le nom de murs, canaux ou veine. Cet aspect particulier pris par la microstructure est probablement répercuté sur le spectre de distribution des contraintes à courte distance des dislocations : le nombre de dislocations fortement bloquées semblant devenir prédominant, l'aspect du spectre ne sera probablement plus du type distribution exponentielle, puisque celui-ci prédit un maximum de dislocations avec une contrainte à courte distance nulle …
- dans le même ordre d'idée et toujours à cause de l'évolution de la microstructure vers cette organisation très structurée, le lien qui est établi entre contrainte à courte distance et contrainte à longue distance peut éventuellement être mis en défaut. Plus précisément, si à faible densité de dislocations il semble assez logique que les dislocations, vu qu'elles sont presque toutes mobiles, puissent se positionner facilement dans des configurations d'équilibre semblables pour peu qu'elles possèdent des contrainte à courte distance semblables, le résultat n'est pas nécessairement le même dans des microstructures très structurées à forte densité.

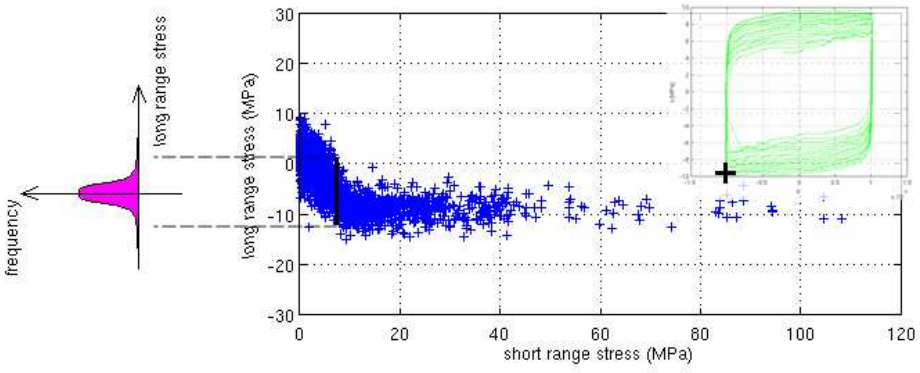


fig. 35 Symbolisation du manque de netteté du lien {contrainte à courte - contrainte à longue distance}.

En d'autre termes, l'aspect diffus du nuage de point dans le plan {contrainte à courte distance — contrainte à longue distance}, mis en évidence aussi par la fonction de répartition sur la figure 35, peut augmenter rendant le lien beaucoup moins net. On notera toutefois que cette vision d'une microstructure très rangée et n'évoluant en aspect que très lentement semble être mise en défaut par les travaux expérimentaux présentés par [**Gaudin** 02]. Ces auteurs montrent en effet qu'au renversement de la contrainte, le rangement des murs et canaux est largement bouleversé par le renversement du sens de chargement au cours du cycle, permettant peut-être aux dislocations de se réarranger conformément à un lien contrainte courte – contrainte longue distance univoque.

- enfin, la non-nullité de l'écart-type symbolisant l'aspect diffus du lien entre les composantes à courte et longue distance des contraintes (figure 35) peut dans notre travail être attribué à l'effet de tension de ligne, qui a été quelque peu éludé du problème jusqu'ici. En effet, conformément à la formule d'équilibre dynamique :

$$\frac{0{,}5Gb}{R} + \tau_{app} - \tau_{mic} - \tau_0 - \frac{B}{b}v = 0$$

gérant le mouvement d'une dislocation, l'équilibre d'un segment de dislocation est fortement conditionné, en plus des deux termes à courte et longue distance de la contrainte interne τ_{mic}, par le terme de tension de ligne $\frac{0{,}5Gb}{R}$ au cas où les rayons de courbure locaux sont faibles. Dans les simulations présentées, les rayons sont en moyenne égaux à 1,5 µm, allant parfois jusqu'à 0,5 µm. Cela donne donc des contraintes locales additionnelles d'environ 4 MPa, parfois jusqu'à 11 MPa. Cela peut expliquer la dispersion d'une dizaine de MPa de la contrainte à longue distance. Une étude plus fine de ce terme de tension de ligne mériterait d'être réalisée.

Enfin, on retient que les résultats présentés dans ce chapitre décrivent une représentation de la microstructure adaptée au *glissement simple*. Quelques travaux concernant l'extension des résultats au *glissement multiple* ont toutefois été réalisés dans cette thèse. Ils ne sont cependant pas présentés dans ce chapitre, pour ne pas nuire (de par leur lourdeur) à la présentation du modèle de plasticité cristalline du chapitre suivant. En effet, ce chapitre exploite dans un premier temps les résultats précédents pour élaborer un modèle de plasticité cristalline restreint au glissement simple, puis dans un second temps seulement étendu au glissement multiple. Ce n'est qu'à ce moment que l'on aborde les aspects glissement multiple et DDD.

6 CONCLUSION

Ce chapitre nous a conduit à nous intéresser aux microstructures de dislocations engendrées par des sollicitations cycliques de faible amplitude en glissement simple. Le but était d'identifier les causes de l'écrouissage cinématique, visible sur le cycle mécanique macroscopique d'un monocristal de métal CFC. Il est mis en évidence qu'une microstructure de dislocations de densité donnée génère une contrainte hétérogène à l'origine de cet écrouissage. L'origine de cette hétérogénéité réside dans le fait que la microstructure présente plusieurs types de dislocations pouvant être classées par type de comportement :

- certaines sont très mobiles et accommodent beaucoup de déformation plastique,

- d'autres le sont beaucoup moins, ont tendance à se stocker et à gêner le mouvement des dislocations mobiles avec des intensités variables.

Cette situation crée une hétérogénéité de la déformation plastique dans la microstructure, et engendre naturellement des contraintes internes hétérogènes dans le métal.

Au delà de cette description classique, l'apport majeur de ce chapitre réside dans le fait que l'on a réussi à décrire cette hétérogénéité de façon systématique, en classant les dislocations par groupe. Un groupe se distingue d'un autre par le niveau de contrainte vu par les dislocations qui le constituent ; les dislocations d'un groupe adoptent donc toutes le même comportement puisque soumises à un même niveau de contrainte. Il a pu être montré par ailleurs que, pour une densité de dislocations donnée, la représentativité de chaque groupe n'est pas aléatoire, mais déterminée par une fonction de probabilité directement liée à la densité. On propose ainsi une manière originale de décrire une microstructure de dislocations, qui peut être exploitée facilement pour faire évoluer les modèles de plasticité cristalline. C'est l'objet du chapitre suivant.

CHAPITRE 2

Développement d'un modèle de plasticité cristalline

SOMMAIRE

1 INTRODUCTION 59

2 MODELE PHYSIQUE EN GLISSEMENT SIMPLE 59

2.1 DESCRIPTION DE LA MICROSTRUCTURE DE DISLOCATIONS : VARIABLES D'ETAT 59
2.2 LOI D'ECOULEMENT 61
2.3 LOI D'ETAT DETERMINANT LES CONTRAINTES A LONGUE DISTANCE 61
2.4 BILAN ENERGETIQUE 62
2.5 LOI DE PRODUCTION DE DISLOCATIONS 64
2.6 BILAN DES EQUATIONS 66
2.7 DISCUSSION 66
2.7.1 A propos de l'extrapolation des résultats DDD 66
2.7.2 A propos de la taille du VER 69
2.7.3 A propos de la gestion des variables d'état 69

3 ANALYSE DU COMPORTEMENT CYCLIQUE EN GLISSEMENT SIMPLE D'UN VER DE CRISTAL CFC 70

3.1 EVOLUTION DU COMPORTEMENT MECANIQUE 70
3.2 EVOLUTION DES VARIABLES INTERNES 72
3.3 BILAN ENERGETIQUE 74
3.4 DISCUSSION 76

4 EXTENSION DU MODELE AU GLISSEMENT MULTIPLE 77

4.1 VARIABLES D'ETAT 77
4.2 REECRITURE DES EQUATIONS 78
4.3 REMARQUES 78

5 CONCLUSION 80

6 ANNEXES 81

6.1 ANNEXE 1- LOI D'ECOULEMENT LOCALE 81
6.2 ANNEXE 2 - LOI D'ETAT PILOTANT LA CONTRAINTE A LONGUE DISTANCE 82

1 INTRODUCTION

Ce chapitre a pour objectif l'écriture d'un modèle de plasticité cristalline s'appuyant sur les concepts dégagés dans le premier chapitre. La simulation du comportement du monocristal en DDD met en effet en évidence des spécificités du comportement local des dislocations dans la microstructure. Le glissement des dislocations n'y est pas uniforme et il en résulte l'apparition d'une hétérogénéité de contrainte en son sein. Il est montré que cette hétérogénéité de comportement des dislocations se décrit de façon originale en classant les dislocations par contrainte à courte distance selon des groupes de proportion connues. Le modèle de plasticité cristalline développé dans ce chapitre utilise *directement* cette manière de décrire la microstructure, ce qui le rend alors apte à reproduire les effets d'écrouissage cinématiques lorsque les trajets de chargement changent de sens.

Dans un souci de simplicité, le modèle est d'abord construit pour décrire le comportement plastique sur un seul système de glissement. De cette façon, bien que l'écriture soit simple, le comportement mécanique de tout monocristal CFC bien orienté par rapport à la direction de chargement et soumis à des déformations plastiques qui restent faibles (pour que les rotations du réseau cristallin induites n'affectent pas la cission sur les systèmes) peut être simulé. Cette écriture est particulièrement adaptée à la simulation de la fatigue à grand nombre de cycles (jusqu'à $\Delta\varepsilon_p \cong 10^{-3}$).

Dans un second temps, le modèle est étendu au glissement multiple, pour le rendre capable de gérer des grands taux de déformation plastique, atteints par exemple en traction monotone ou en fatigue oligo-cyclique. La réécriture du modèle en glissement multiple n'est toutefois pas complexe, car elle adopte la même forme que celle obtenue en glissement simple, mais utilise en lieu et place des paramètres scalaires des paramètres du type matrices d'interactions, plus lourdes à gérer et à identifier.

L'exploitation du modèle (en termes d'étude de capabilité) figure dans le troisième chapitre.

2 MODELE PHYSIQUE EN GLISSEMENT SIMPLE

Ce paragraphe décrit les étapes nécessaires à la mise en place des équations qui fondent le modèle physique de plasticité décrivant le comportement mécanique d'un seul système de glissement d'un métal CFC et s'appuyant sur les résultats de l'analyse des microstructures du chapitre 1. Après un bilan sur le principe de description de la microstructure de dislocations dans un Volume Elémentaire Représentatif (VER), la loi d'écoulement, les contraintes internes et la loi gérant la production des dislocations en son sein sont passées en revue. Le paragraphe se conclut par une discussion mettant en évidence les extrapolations réalisées issues de la DDD qui conditionnent la construction du modèle et le questionnement qu'elles génèrent.

2.1 DESCRIPTION DE LA MICROSTRUCTURE DE DISLOCATIONS : VARIABLES D'ETAT

Dans le premier chapitre, le paramètre d'état fondamental caractérisant la microstructure *globalement* à un instant *t* donné est sa densité ρ. Nous avons alors vu que ce paramètre seul n'est pas suffisant puisqu'il ne donne aucune indication sur les spécificités locales de la microstructure. Celles-ci consistent en des

dislocations non-uniformément réparties en volume qui effectuent des glissements plastiques différents et génèrent ainsi un champ de contrainte hétérogène. Il est toutefois montré que cet état de contrainte hétérogène est décrit méthodiquement en introduisant :

- une première série (semi-infinie) de variables d'état, notée s, prenant des valeurs aléatoires s'étendant de 0 à l'infini ($+\infty$), qui physiquement représente l'ensemble des niveaux de contrainte à courte distance potentiellement subis par une dislocation, ou autrement dit l'ensemble des seuils potentiels d'activation de son glissement (paragraphe 5.2, chapitre 1) ;
- une seconde série (semi-infinie) de variables d'état, notées $f_\rho(s)$, qui est une densité de probabilité construite sur la variable aléatoire s, indiquant la probabilité qu'a une dislocation donnée de subir un champ de contrainte à courte distance égal à une valeur s donnée (paragraphe 5.2, chapitre 1) ;
- une troisième série (semi-infinie) de variables d'état, notée $X(s)$, qui représente le champ de contrainte à longue distance s'exerçant sur n'importe quelle dislocation dont la contrainte à courte distance vaut s (paragraphe 5.3, chapitre 1).

On identifie donc au total une variable scalaire (ρ), à laquelle on ajoute trois séries infinies de variables (s, $f_\rho(s)$ et $X(s)$) pour représenter l'état de la microstructure de dislocations à un instant t. Ceci au prime abord crée un nombre de variables supplémentaire qui peut apparaître énorme en première analyse. Toutefois, cette infinité de variables se réduit partiellement[9] : en effet, il a été montré que ces variables ne sont pas toutes indépendantes, puisque des lois d'état lient certaines d'entre elles. Comme l'indique la notation explicite $f_\rho(s)$, la variable s est liée à la variable f_ρ par :

$$f_\rho(s) = \frac{1}{\bar{s}} \exp\left(-\frac{s}{\bar{s}}\right) = \text{distribution exponentielle (validé en DDD au moins à faible densité)} \quad (1)$$

et à la densité ρ par :

$$\bar{s} = \int_0^{+\infty} f_\rho(s)\, s\, \mathrm{d}s = \alpha\mu b\sqrt{\rho} \quad (2)$$

Par ailleurs, il a été montré au paragraphe 5.3 du chapitre 1 qu'il existe (au moins à faible densité de dislocations) un lien entre la contrainte à courte distance s et la contrainte interne à longue distance X, traduit explicitement par la notation $X(s)$. La loi d'état reste toutefois à préciser (paragraphe 2.3).

Au bilan, la microstructure présente dans un VER est donc entièrement décrite par sa densité ρ, et par (l'unique) infinité de groupes de dislocations, notés $\mathcal{C}_s$, dont on connaît pour chacun :

- les proportions grâce à $f_\rho(s)$,
- le niveau de contrainte à courte distance s,
- le niveau de contrainte à longue distance $X(s)$,
- et donc potentiellement le comportement de chacune des dislocations qui le constituent.

[9] Cette infinité constitue également une réduction par rapport à une description du type DDD où il faut donner l'infinité des segments avec leur position, leur orientation et leur longueur pour représenter la microstructure.

C'est ce dernier comportement qu'il faut désormais expliciter pour exploiter cette description originale en plasticité cristalline.

2.2 LOI D'ECOULEMENT

Les dislocations du VER appartenant à un groupe de dislocations $\mathcal{C}_s$ donné présentent toutes un comportement *a priori* identique vis-à-vis du glissement plastique, puisque elles subissent *a priori* toutes la même intensité de contrainte à courte et à longue distance. A un instant t donné et sous une cission appliquée τ donnée, elles adoptent donc toutes la même vitesse sous ce champ de contrainte. Elles participent donc toutes de façon égale au taux de déformation plastique globale du VER, noté $\dot{\bar{\gamma}}_p$. Cette participation individuelle est le taux de déformation accommodé par tout segment de dislocation appartenant à $\mathcal{C}_s$ et est noté $\dot{\gamma}_p(s)$. Puisque la représentativité de chaque groupe $\mathcal{C}_s$ dans la microstructure est donnée par la densité de probabilité $f_\rho(s)$, il est possible de lier le taux de déformation global au taux de déformation de chaque dislocation par la somme pondérée :

$$\dot{\bar{\gamma}}_p = \int_0^{+\infty} f_\rho(s)\, \dot{\gamma}_p(s)\, \mathrm{d}s \tag{3}$$

Cette loi est une loi d'écoulement, que l'on qualifie de *globale* puisqu'elle lie le taux de déformation total du VER au taux de déformation local accommodé par tout segment de dislocation du groupe $\mathcal{C}_s$.

Au niveau local, c'est-à-dire en considérant un segment de dislocation donné appartenant à $\mathcal{C}_s$, le taux de déformation $\dot{\gamma}_p(s)$ qu'il accommode est calculé par une expression qui le relie aux contraintes à courte et à longue distance s et $X(s)$ qui l'ont engendré. Cette relation, que l'on qualifie alors de loi d'écoulement *local*, est déterminée suivant des principes désormais classiques issus de la théorie de l'activation thermique appliquée au mouvement d'une dislocation. Cette loi prend la forme ci-dessous :

$$\dot{\gamma}_p(s) = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau - X(s)}{\tau^* + s} \right|^{\frac{1}{m}} \mathrm{sign}\big(\tau - X(s)\big) \tag{4}$$

où τ est la cission appliquée (uniformément) sur le VER, et τ^* la cission effective dépendant de la température. L'écriture de cette formule est démontrée en annexe 1.

On remarque que la combinaison des équations (3) et (4) permet d'établir le lien recherché entre le taux de déformation globale du VER et la cission qui lui est appliquée, à condition toutefois de connaître $f_\rho(s)$ et $X(s)$. Si $f_\rho(s)$ est connue grâce aux relations (1) et (2) pour une densité ρ donnée, la loi d'état liant s à $X(s)$ n'a pas encore été explicitée. C'est le but du paragraphe suivant.

2.3 LOI D'ETAT DETERMINANT LES CONTRAINTES A LONGUE DISTANCE

L'hétérogénéité de comportement au glissement de chaque groupe de dislocations $\mathcal{C}_s$ génère au sein de la microstructure une déformation plastique hétérogène $\gamma_p(s)$ dont la compatibilité est assurée par l'apparition d'une contrainte interne à longue distance. Cette contrainte à longue distance est subie par

chaque segment de dislocation. Elle est (cf. paragraphe 5.3 du chapitre 1), au moins à densité faible, la même pour tout segment d'une même classe $\mathcal{C}_s$, justifiant la notation $X(s)$. Sur un incrément de temps, les dislocations de $\mathcal{C}_s$ accommodent toutes une déformation $d\gamma_p(s)$, participant pour $f_\rho(s)d\gamma_p(s)ds$ à la déformation totale $d\overline{\gamma_p}$. Comme $d\overline{\gamma_p}=\int_0^{+\infty} f_\rho(s)d\gamma_p(s)ds$ et $d\gamma_p(s)$ ne sont *a priori* pas identiques (sauf dans le cas d'une microstructure *homogène* constituée par des dislocations subissant toutes la même contrainte à courte distance s, ce qui se traduirait par $f_\rho(s) = \delta(s-s_0)$, $\delta(s)$ étant la distribution de Dirac), il en résulte localement une incompatibilité de déformation plastique, traduit par la différence non nulle $d\gamma_p(s) - d\overline{\gamma_p}$. L'incrément de contrainte interne $dX(s)$ créé rétablit la compatibilité géométrique, en induisant une déformation *élastique* opposée à cette différence. Par application de la loi de Hooke, on a donc une dépendance linéaire de cet incrément par rapport à l'hétérogénéité de déformation, ce qui s'écrit $dX(s) = M_\rho\mu(d\gamma_p(s) - d\overline{\gamma_p})$, ou encore par intégration par rapport au temps :

$$X(s) = M_\rho\mu\left(\gamma_p(s) - \overline{\gamma_p}\right) \tag{5}$$

Le coefficient M_ρ introduit ici a une signification phénoménologique. Le principe de raisonnement qui permet d'ébaucher cette formule est donné en annexe 2.

On remarque par ailleurs que la formule (5) est finalement une loi d'état, qui permet d'utiliser indifféremment les variables $X(s)$ ou $\gamma_p(s)$ pour traduire l'état de la microstructure. La microstructure présente dans un VER peut donc être entièrement décrite à un instant t par sa densité ρ, et par (l'unique) infinité de groupes de dislocations, notés $\mathcal{C}_s$, dont on connaît pour chacun :

- les proportions grâce à $f_\rho(s)$,
- le niveau de contrainte à courte distance s,
- le niveau de déformation $\gamma_p(s)$ qui est accommodé par les dislocations qui le constituent.

Ce dernier terme représente *la mémoire de l'histoire* de la déformation plastique appliquée au matériau, et son évolution est donnée par (4).

2.4 BILAN ENERGETIQUE

La cission effective nécessaire au mouvement d'un segment de dislocation donné appartenant à la classe $\mathcal{C}_s$ est lié aux contraintes appliquée au VER τ et internes s et $X(s)$ par $\tau^* = \tau - s\cdot\mathrm{sign}\left(\dot{\gamma}_p(s)\right) - X(s)$ (voir annexe 1). Lors de son mouvement, ce segment induit un taux de déformation $\dot{\gamma}_p(s)$: la puissance volumique mise en jeu au cours de cet événement est donc $\tau^*\times\dot{\gamma}_p(s)$. Par intégration sur l'ensemble de la microstructure représentée par l'infinité de groupe $\mathcal{C}_s$ en proportion $f_\rho(s)$, on obtient la puissance volumique instantanée requise pour mouvoir la microstructure, $P_{mic} = \int_0^{\infty} f_\rho(s)\,\tau^*\times\dot{\gamma}_p(s)\,ds$, qui s'écrit encore en remplaçant τ^* par sa valeur :

$$P_{\text{mic}} = \tau \times \dot{\overline{\gamma}}_{\text{p}} - \int_0^{\infty} f_{\rho}(s)\, s \times |\dot{\gamma}_{\text{p}}(s)|\, \mathrm{d}s - \int_0^{\infty} f_{\rho}(s)\, X(s) \times \dot{\gamma}_{\text{p}}(s)\, \mathrm{d}s \qquad (6)$$

On remarque donc, en réarrangeant cette expression et en reconnaissant la puissance volumique fournie au VER $P_{\text{fournie}} = \tau \times \dot{\overline{\gamma}}_{\text{p}}$, que la puissance fournie induit trois effets dans le cristal, associés à chacun des trois termes :

$$P_{\text{fournie}} = P_{\text{mic}} + \int_0^{\infty} f_{\rho}(s)\, s \times |\dot{\gamma}_{\text{p}}(s)|\, \mathrm{d}s + \int_0^{\infty} f_{\rho}(s)\, X(s) \times \dot{\gamma}_{\text{p}}(s)\, \mathrm{d}s$$

Les effets de la puissance fournie sont les suivants :

- Faire simplement bouger les dislocations de la microstructure, ce qui prélève la part P_{mic}. En général, comme la cission τ^* nécessaire au mouvement des dislocations est faible[10] par rapport à la cission τ appliquée sur le VER (d'autant plus que la température est élevée), cette puissance est presque négligeable : changer la configuration spatiale des dislocations n'a donc pas un très grand coût énergétique.
- Convertir le reste, ce qui prélève deux parts (représentées par les deux termes restants). On remarque que le premier terme est toujours positif, il consomme donc de la puissance (qui sera dissipée en chaleur). Le second peut par contre être négatif, et dans ce cas, ce terme restitue de la puissance qui était stockée dans la microstructure. Le premier terme a donc une fonction dissipative pure[11], notée $P_{\text{dissipée}} = \int_0^{\infty} f_{\rho}(s)\, s \times \dot{\gamma}_{\text{p}}(s)\, \mathrm{d}s$, et le second une fonction de stockage d'énergie, notée $P_{\text{stockée}} = \int_0^{\infty} f_{\rho}(s)\, X(s) \times \dot{\gamma}_{\text{p}}(s)\, \mathrm{d}s$.

Au final, on a donc :

$$P_{\text{fournie}} = P_{\text{mic}} + P_{\text{dissipée}} + P_{\text{stockée}}$$

La modélisation effectuée fait donc apparaître un bilan énergétique réaliste, conforme avec les notions habituellement utilisées en plasticité. L'évaluation de ces grandeurs au cours de la déformation plastique est donc à portée de main.

[10] Dans le cuivre, la friction de réseau à température ambiante est de l'ordre de 4MPa.

[11] La puissance P_{mic} nécessaire à la mise en mouvement des dislocations étant lui-même un terme dissipatif, la tendance adoptée dans ce travail est de la grouper avec le second terme, de sorte que : $P_{\text{dissipée}} = P_{\text{mic}} + \int_0^{\infty} f_{\rho}(s)\, s \times \dot{\gamma}_{\text{p}}(s)\, \mathrm{d}s = \int_0^{\infty} f_{\rho}(s)\, (\tau^* + s) \times \dot{\gamma}_{\text{p}}(s)\, \mathrm{d}s$

2.5 LOI DE PRODUCTION DE DISLOCATIONS

Les équations (1) à (6) précédemment démontrées traduisent l'état physique et l'écoulement d'une microstructure dont la densité ρ est connue. La modélisation de plasticité cristalline ébauchée ci-dessus est donc complète si l'on fournit la loi d'évolution de cette densité en fonction de la déformation plastique imposée au VER. Classiquement, cette loi d'évolution traduit une compétition entre un terme de production de dislocations et un terme d'annihilation [**Fivel** *et al.* 98], et s'exprime par :

$$\dot{\rho} = \frac{1}{b}\left(\frac{\sqrt{\rho}}{K} - 2y_c\rho\right)\left|\dot{\bar{\gamma}}_p\right|$$

Nous avons cependant montré au chapitre 1 paragraphe 4.1 que dans le cas de sollicitations cycliques, la production de dislocations subit sur un cycle des fluctuations importantes qui ne sont pas le fait des annihilations, mais de fonctionnement de boucles de Frank-Read en sens inverse qui « ré-avale » les dislocations produites à la charge. Ces fluctuations sont rappelées sur la figure 1 ci-dessous.

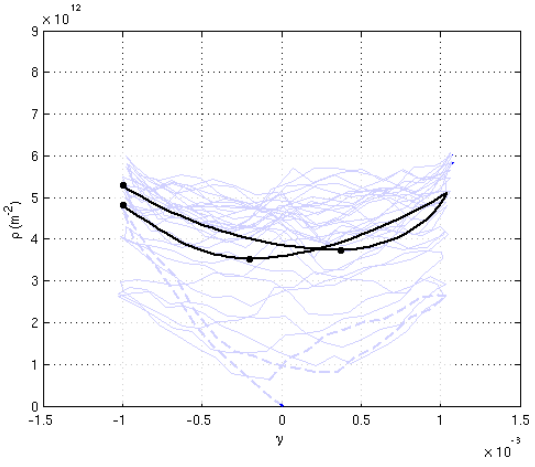


fig. 1 Schématisation sur *un cycle* de l'évolution de la densité de dislocations dans un monocristal.

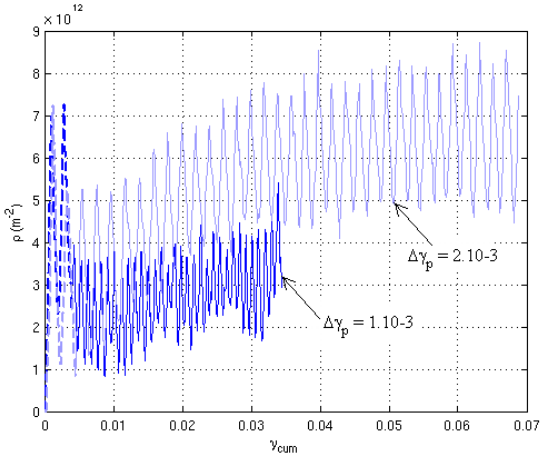


fig. 2 Evolution de la densité en fonction de la déformation plastique cumulée, pour deux amplitudes de déformation différentes.

Cette réversibilité de la production de dislocations est par ailleurs un phénomène qui dépend de l'amplitude de la déformation plastique appliquée comme le montre les simulations DDD de la figure 2. Cette réversibilité est d'autant plus grande que la déformation plastique imposée est faible, impliquant une accumulation plus lente des dislocations dans le matériau à faible amplitude de déformation imposée. Ce point a été montré expérimentalement à de nombreuse reprises [**Gaudin** *et* **Feaugas** 04, **Polak** 87].

La réversibilité parfaite est atteinte pour une microstructure constituée des boucles de Frank-Read situées sur des plans assez éloignés pour lesquels le glissement dévié serait inhibé. Dans ce cas, la microstructure stocke de l'énergie à la charge, mais celle-ci est entièrement restituée lorsque l'on revient à déformation nulle.

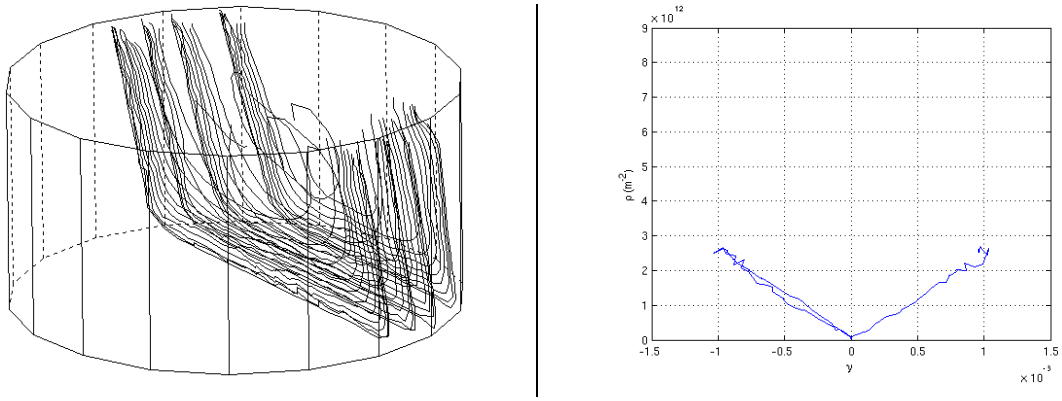


fig. 3 Evolution de la densité de dislocations d'une microstructure fictive constituée de 4 plans de glissements. On remarque la réversibilité parfaite de la densité de dislocations.

Dans ce problème élémentaire très schématique, en appelant P la puissance stockée par la microstructure à un instant t, la production de dislocations est trivialement traduite par l'équation suivante :

$$\dot{\rho} = \frac{1}{bD}\dot{\gamma}_p = \frac{1}{bD}\,\mathrm{sign}(P)\,|\dot{\gamma}_p|$$

où D est la taille des empilements. Par analogie avec ce problème élémentaire et puisque les dislocations qui engendrent ce phénomène de fluctuation sont des dislocations empilées, la loi d'évolution de la densité de dislocations est écrite de la façon suivante :

$$\dot{\rho} = \frac{1}{b}\left(\frac{\sqrt{\rho}}{K} \times \mathrm{sign}(P_{\text{stockée}}) - 2y_c\rho\right)|\dot{\bar{\gamma}}_p| \qquad (7)$$

où $P_{\text{stockée}}$ est définie dans le paragraphe précédent (§2.4). Cette expression, obtenue avec un bonne part d'intuition, présente une pertinence vis-à-vis de ses performances propres qui sont montrées dans le chapitre 3.

2.6 BILAN DES EQUATIONS

La modélisation de plasticité cristalline construite ci-dessus se résume donc à un système de 6 équations. Celles-ci sont regroupées par type dans le tableau ci-dessous.

Description de la microstructure à un instant t	Variable d'état :	$\rho - f_\rho(s) - s - X(s) - \gamma_p(s)$
	Loi d'état :	$f_\rho(s) = \frac{1}{\bar{s}} \exp\left(-\frac{s}{\bar{s}}\right)$ (1)
		$\bar{s} = \alpha\mu b\sqrt{\rho}$ (2)
		$X(s) = M_\rho \mu \left(\gamma_p(s) - \overline{\gamma_p}\right)$ (3)
Evolution de la microstructure à un instant t	Loi d'évolution	$\dot{\rho} = \frac{1}{b}\left(\frac{\sqrt{\rho}}{K} \times \text{sign}(P_{\text{stockée}}) - 2y_c\rho\right) \lvert \dot{\overline{\gamma_p}} \rvert$ (4)
Ecoulement plastique à un instant t	Loi d'écoulement *locale*	$\dot{\gamma}_p(s) = \dot{\gamma}_0 \left\lvert \frac{\tau - X(s)}{\tau^* + s} \right\rvert^{\frac{1}{m}} \text{sign}\left(\tau - X(s)\right)$ (5)
	Loi d'écoulement *globale*	$\dot{\overline{\gamma_p}} = \int_0^{+\infty} f_\rho(s)\, \dot{\gamma}_p(s)\, ds$ (6)
Evolution énergétique à un instant t	Puissance fournie	$\tau \times \dot{\overline{\gamma_p}}$
	Puissance dissipée	$\int_0^{\infty} f_\rho(s)\, (\tau^* + s) \times \dot{\gamma}_p(s)\, ds$
	Puissance stockée	$\int_0^{\infty} f_\rho(s)\, X(s) \times \dot{\gamma}_p(s)\, ds$

Tableau 1 : modélisation micromécanique d'un VER CFC en glissement *simple*

2.7 DISCUSSION

2.7.1 A PROPOS DE L'EXTRAPOLATION DES RESULTATS DDD

L'élaboration de ce modèle est fondée principalement sur des observations en Dynamique des Dislocations qui permettent d'identifier les variables d'état nécessaires pour caractériser de façon univoque l'état et l'évolution d'une microstructure de dislocations soumise à une sollicitation mécanique. Les erreurs que cela peut engendrer sont surtout liées aux extrapolations de ces résultats obtenus à faible densité vers des densités élevées. En particulier, deux questions importantes se posent en regard de cette extrapolation.

- Est-ce que la loi d'évolution de la proportion $f_\rho(s)$ des groupes de dislocations $\mathcal{C}_s$ est toujours assimilée à une loi exponentielle à haute densité de dislocations ?
- Est-ce que le lien entre s et $X(s)$ est toujours valide à forte densité de dislocations ?

Des éléments de réponses sont apportés à la première question, en réalisant une microstructure 2D constituée de dislocations coins situés aléatoirement dans une aire de 20×20µm², avec différentes

densités (voir figure 5). Pour chaque dislocation tirée aléatoirement, il est possible de connaître la distance d à ses plus proches voisins, et alors de tracer le spectre de répartition de $1/d$ qui est supposé prendre la même forme que la contrainte à courte distance, puisque celle-ci est induite par les dislocations voisines et que le champ de contrainte d'une dislocation en un point est proportionnel à l'inverse de la distance à la dislocation. Ce spectre est présenté pour plusieurs densités sur la figure 5. On remarque que pour la gamme de densités simulées en DDD (10^{11} à 10^{12} m^{-2}), ces spectres se rapprochent assez bien de distributions exponentielles, mais glissent progressivement vers un autre type de distribution lorsque la densité augmente. On remarque toutefois l'augmentation de la moyenne et de l'écart-type lorsque la densité augmente, en accord avec la DDD. Pour quantifier cette évolution, une série de 200 simulations de ce type ont été lancées pour des densités aléatoires comprises entre 10^{11} et 10^{15} m^{-2}, avec à chaque fois un relevé de la moyenne $\overline{1/d}$ et de l'écart-type $\sigma_{1/d}$ de l'inverse de la distance au plus proche voisin. L'analyse des dépendances entre ρ, la moyenne $\overline{1/d}$ et l'écart-type $\sigma_{1/d}$ est donnée sur la figure 4.

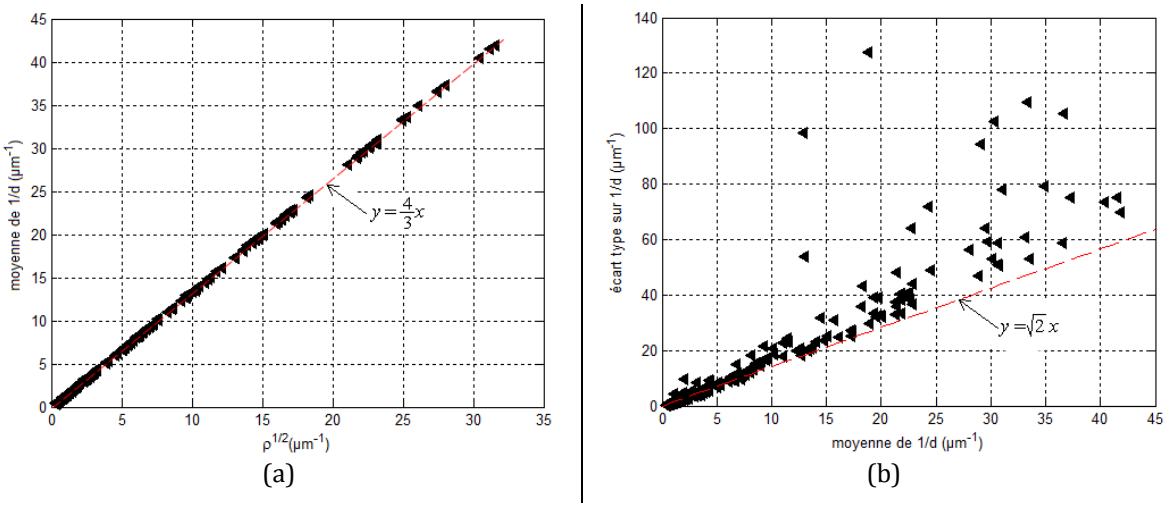


fig. 4 Lien entre : (a) $\sqrt{\rho}$ et $\overline{1/d}$ et (b) $\overline{1/d}$ et $\sigma_{1/d}$ pour des microstructures 2D de densités aléatoires.

On remarque sur la figure 4(a) qu'il existe un lien « parfait » de proportionnalité entre $\overline{1/d}$ et $\sqrt{\rho}$ avec un coefficient 4/3. Il est intéressant de remarquer que l'ordinateur permet de retrouver cette proportionnalité qui a été déjà démontrée dans les années '60 dans le modèle statistique de Friedel dit des « arbres forets » [Friedel 64]. S'il s'agit de dislocations coins, l'intensité moyenne de l'interaction $\bar{s}$ peut être évaluée grossièrement en utilisant la formule indiquant la contrainte d'interaction entre deux dislocations distantes de d, soit : $\bar{s} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \overline{\frac{1}{d}}$. Comme $\overline{\frac{1}{d}} = \frac{4}{3}\sqrt{\rho}$, on obtient alors (en prenant ν = 0,3) :

$$\bar{s} = \frac{4}{3} \times \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sqrt{\rho} \cong 0{,}35 \mu b \sqrt{\rho}$$

on retrouve donc des valeurs classiques du coefficient α avec ce simple modèle. Ce qui est aussi remarquable, c'est la proportionnalité entre la moyenne $\overline{1/d}$ et l'écart-type $\sigma_{1/d}$, avec un coefficient de proportionnalité d'environ $\sqrt{2}$, surtout valable à faible densité.

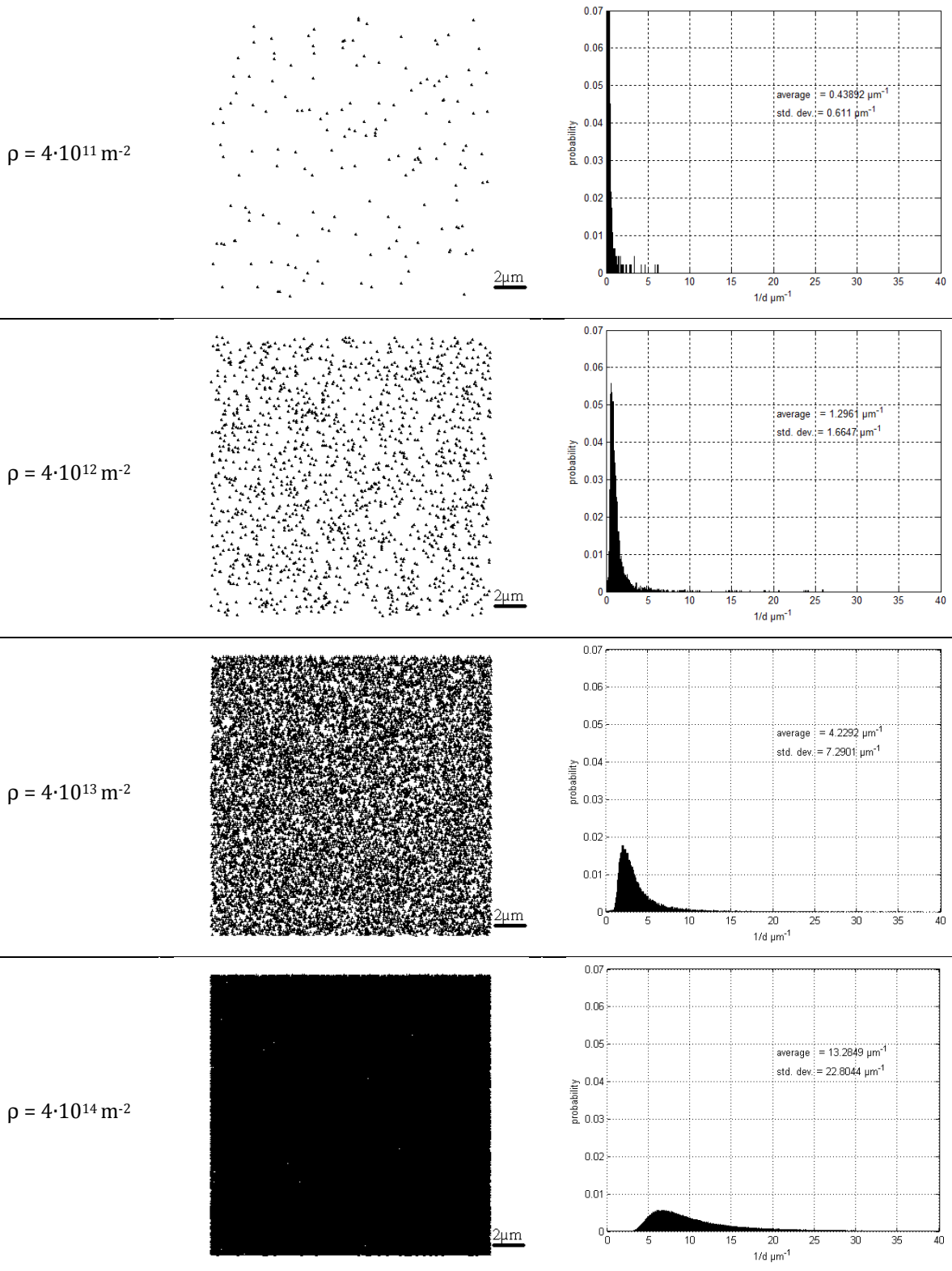


fig. 5 Spectre de répartition de l'inverse de la distance au plus proche voisin pour différentes densités

Connaître la fonction densité de probabilité f_ρ associée à cette caractéristique et s'adaptant au mieux au spectre « expérimental » trouvé à la figure 5 n'est pas évident. On propose toutefois des alternatives à la distribution exponentielle, comme la distribution de Rayleigh, ou encore la distribution log-normale qui semble s'adapter au mieux au spectre trouvé par tirages aléatoires, comme l'indique la figure 6.

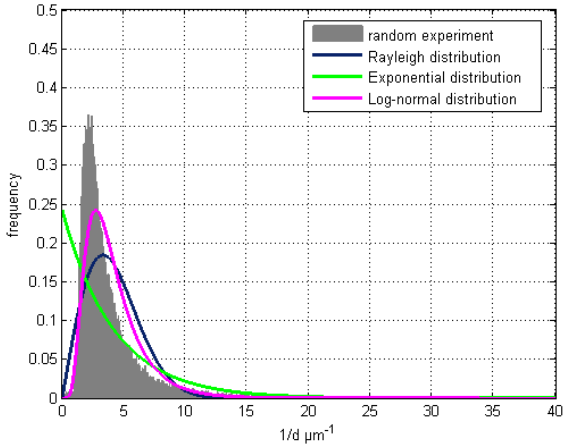


fig. 6 Essai d'adaptation de densités de probabilités analytiques connues sur le spectre obtenu par tirages aléatoires (ici pour $\rho = 10^{13}$ m^{-2}).

2.7.2 A PROPOS DE LA TAILLE DU VER

La modélisation du comportement plastique d'un VER de cristal CFC présentée ci-dessus repose sur une description statistique de la microstructure. Par conséquent, le VER doit être choisi de taille « suffisamment grande » pour que celui-ci inclue un nombre des segments de dislocations suffisant. En glissement simple, la microstructure s'organise en bandes de glissement régulièrement réparties, séparées par une distance h diminuant lorsque la densité de dislocations augmente [**Jaoul** 08], (voir figure 9 du chapitre 1). Le volume du VER ne doit donc pas être inférieur à h^3, au risque de se retrouver dans une zone sans dislocations où la déformation plastique est nulle. On en conclue que le volume minimal du VER est évolutif au cours de la sollicitation, et qu'il doit être assez grand au début de la déformation plastique d'un cristal bien recuit. En général, la distance inter-bande est rarement supérieure à h = 2 µm [**Jaoul** 08], même au début de la déformation plastique d'un cristal bien recuit. Le modèle présenté dans ce mémoire a donc un emploi légitime jusqu'à une échelle de h^3 = 8 µm^3 minimum.

2.7.3 A PROPOS DE LA GESTION DES VARIABLES D'ETAT

D'un point de vue numérique, l'espace semi-infini auquel appartient la variable aléatoire s est pour les besoins restreint (l'infini est par exemple limité à environ s_{max} = 300 MPa, puisqu'il est rare de trouver des résistances locales de plus de cette valeur dans le cuivre) et discrétisé (on forme des groupes de dislocations dont la contrainte à courte distance est comprise entre s et $s + \Delta s$, avec Δs modulable). Le nombre de variable interne fondamentale à gérer est ainsi réduit à $n = 2\frac{s_{max}}{\Delta s} + 1$, constitué de :

- ρ : densité de dislocations
- $\left\{s_1 , s_2 , s_3 , \dots , s_{\frac{n-1}{2}}\right\}$: ensemble fini des seuils d'activation locaux

- $\left\{\gamma_p(s_1)\,,\,\gamma_p(s_2)\,,\,\gamma_p(s_3)\,,\,\dots\,,\,\gamma_p(s_{\frac{n-1}{2}})\right\}$: ensemble fini des déformations locales

Les autres variables d'état $\left\{f_\rho(s_1)\,,f_\rho(s_2)\,,f_\rho(s_3)\,,\,\dots\,,f_\rho(s_{\frac{n-1}{2}})\right\}$ et $\left\{X(s_1)\,,\,X(s_2)\,,\,X(s_3)\,,\,\dots\,,\,X(s_{\frac{n-1}{2}})\right\}$ sont déterminées à partir des variables principales par les $2\times\frac{n-1}{2}$ relations suivantes :

$$f_\rho(s_i) = \frac{1}{\alpha\mu b\sqrt{\rho}}\exp\left(-\frac{s_i}{\alpha\mu b\sqrt{\rho}}\right) \quad \text{et} \qquad X(s_i) = M\mu\left(\gamma_p(s_i) - \overline{\gamma_p}\right) \quad \forall\, i\in[1,\frac{n-1}{2}]$$

L'écoulement plastique est donné par les $\frac{n-1}{2}$ relations faisant intervenir la loi d'écoulement et la somme discrète suivante :

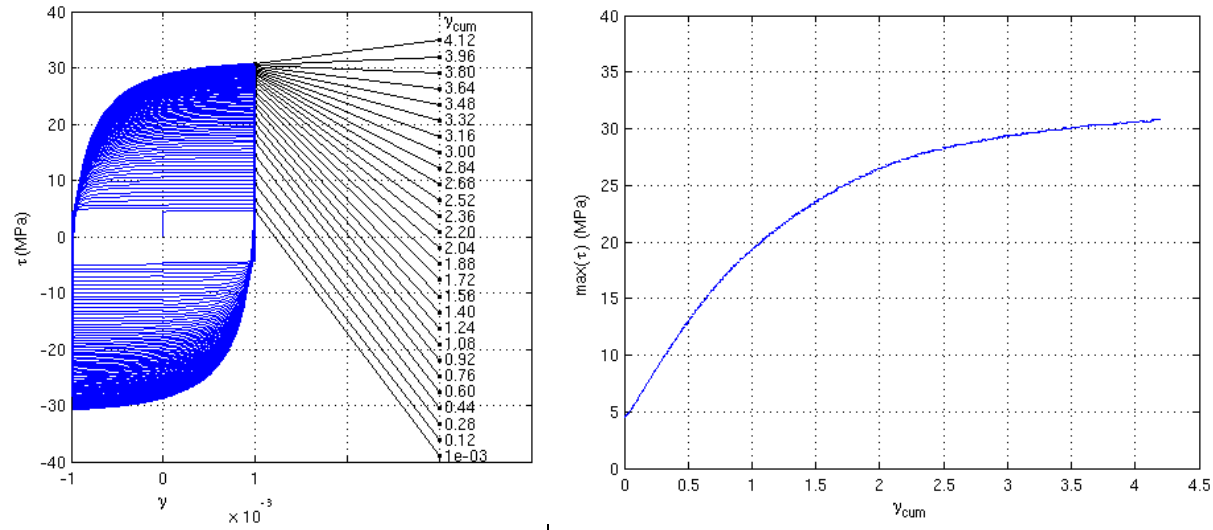
$$\dot{\gamma}_p(s_i) = \dot{\gamma}_0\left|\frac{\tau - X(s_i)}{\tau^* + s_i}\right|^{\frac{1}{m}}\operatorname{sign}\left(\tau - X(s_i)\right) \qquad \forall\, i\in[1,\frac{n-1}{2}] \qquad \text{et} \qquad \dot{\overline{\gamma}}_p = \sum_{i=1}^{\frac{n-1}{2}} f_\rho(s_i)\,\dot{\gamma}_p(s_i)\,\Delta s$$

3 ANALYSE DU COMPORTEMENT CYCLIQUE EN GLISSEMENT SIMPLE D'UN VER DE CRISTAL CFC

Ce court paragraphe met en évidence le résultat d'une simulation du comportement mécanique en glissement simple d'un VER piloté par les équations du modèle construit ci-dessus (voir tableau 1). Il s'agit de donner une idée de l'évolution des variables internes pour mieux appréhender la modélisation qui a été effectuée à partir des résultats de la DDD. La comparaison des comportements mécaniques issus de cette modélisation avec des données expérimentales, ainsi que l'influence de la valeur des variables semi-phénoménologiques telles que α, f_ρ, M_ρ … sur le comportement est proposée au chapitre 3.

3.1 EVOLUTION DU COMPORTEMENT MECANIQUE

Les équations (1) → (6) du tableau 1 sont intégrées pour simuler la réponse d'un VER soumis à une déformation plastique imposée cyclique de $\pm 1\cdot 10^{-3}$. Les 1050 premiers cycles (soit $\gamma_{cum} = 4{,}2$) sont simulés et enregistrés, donnant accès à l'évolution de comportement représentée sur la figure 7.



(a) cycle d'hystérésis | (b) courbe d'écrouissage cyclique

fig. 7 (a) Evolution de la cission en fonction de la déformation plastique (1 cycle sur 30 est représenté) et (b) évolution de la cission *maximale* par cycle en fonction de la déformation plastique cumulée

Les principaux constats à tirer de ce tracé sont :

- l'évolution des cycles *en amplitude*, avec une convergence lente vers un cycle à saturation comme en témoigne la courbe d'écrouissage cyclique,
- l'évolution de *la forme* des cycles.

L'évolution de la forme des cycles se caractérise par un paramètre de forme noté V_H, initialement introduit par [**Mughrabi** 78], définit comme suit et représenté figure 8 :

$$V_H = \frac{\text{aire du cycle}}{\text{aire du rectangle circonscrit au cycle}} \qquad (\text{donc } V_H < 1)$$

On constate que l'effet d'écrouissage cinématique est faible au cours des premiers cycles (effet Bauschinger discret et $V_H \rightarrow 1$) et augmente avec la déformation plastique cumulée (effet Bauschinger plus marqué, et V_H en décroissance).

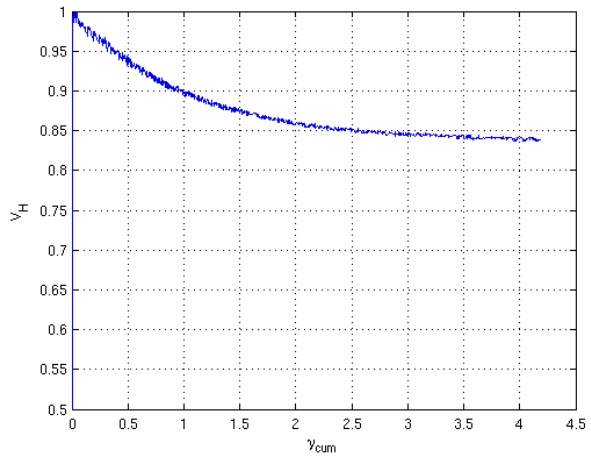


fig. 8 Evolution du paramètre de forme V_H en fonction de la déformation plastique cumulée.

L'évolution du comportement mécanique cyclique pris sur cet exemple spécifique est induite par l'évolution des variables internes du modèle, qui est présentée dans le paragraphe suivant.

3.2 EVOLUTION DES VARIABLES INTERNES

Les variables internes présentées dans ce paragraphe sont successivement la densité de dislocations ρ, la fonction densité de probabilité $f_\rho(s)$ qui en dépend, et la contrainte interne $X(s)$.

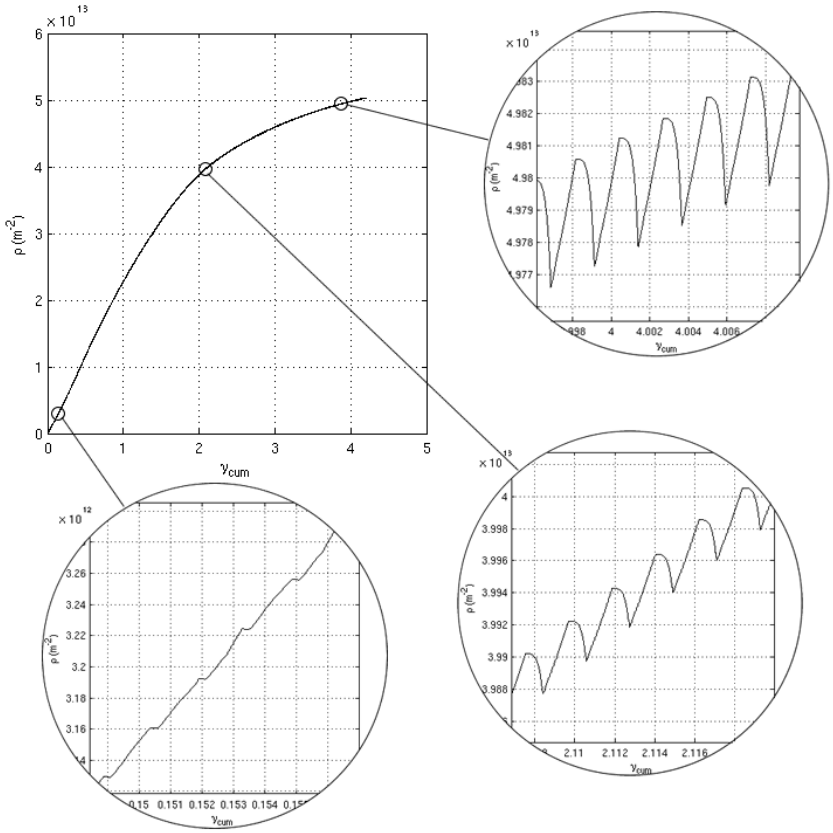


fig. 9 Evolution de la densité de dislocations ρ en fonction de la déformation plastique cumulée γ_{cum}.

La densité de dislocations évolue suivant une loi croissante saturante (voir la figure 9), suivant une forme générale classique que l'on retrouve dans les plupart des modèles de plasticité cristalline actuels. Toutefois, la quantité de déformation plastique cumulée pour atteindre la densité à saturation est dans ce cas de chargement cyclique plus importante que si le chargement était monotone. En effet, on remarque que la loi de production de dislocations modifiée pour le chargement cyclique (équation (4) du tableau 1) induit une évolution *globalement croissante*, mais *partiellement réversible* sur un cycle. Les profils en dent de scie que l'on observe en zoomant sur la figure montrent l'amplitude de cette réversibilité qui est très faible au début du chargement et tend vers 100 % lorsque l'on atteint la densité à saturation.

Le groupement des dislocations selon la valeur de contrainte à courte distance qu'elles subissent au sein de la microstructure est réalisé dans cet exemple grâce à une densité de probabilité de type distribution exponentielle (équation (1) et (2) du tableau 1). La figure 10 montre graphiquement l'évolution de la forme de cette loi en fonction de la densité de dislocations.

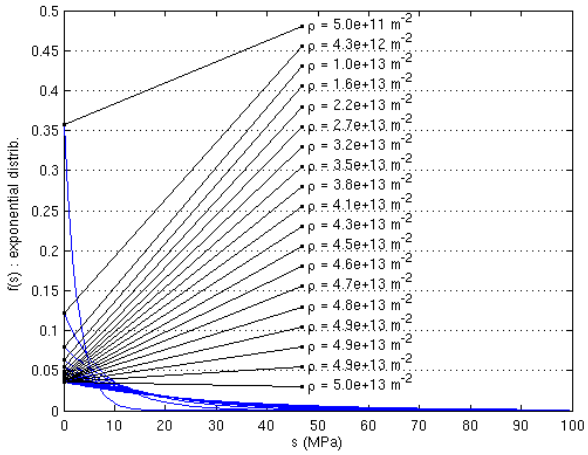


fig. 10 Evolution de la densité de probabilité $f_\rho(s)$ en fonction de la densité de dislocations ρ.

L'évolution de cette loi témoigne de la nature faiblement résistante et homogène de la microstructure lorsque la densité est faible (moyenne faible et écart-type faible). Celle-ci évolue progressivement vers un état plus résistant et plus hétérogène à forte densité de dislocations (moyenne grande et écart-type grand). C'est directement cette distribution qui est responsable de la forme des cycles d'hystérésis sur la figure 7(a). Les premiers cycles présentent une amplitude faible et peu d'écrouissage cinématique (en lien avec la nature peu résistance et homogène de la microstructure) tandis que le cycle à saturation a une amplitude plus importante avec un écrouissage cinématique manifeste (en lien avec la nature résistante et hétérogène de la microstructure).

Enfin, l'évolution de la contrainte interne à longue distance $X(s)$ est observée sur la simulation d'un cycle de fatigue à $\pm 1 \cdot 10^{-3}$ d'amplitude de déformation plastique imposée, sur un VER dont la microstructure a une densité initiale égale à la densité à saturation. Cette évolution est tracée sur la figure 11, suivant quatre étapes de chargement : 1er quart, 2nd quart, 3ème quart, 4ème quart de cycle, avec un suivi point par point. Les observations suivantes sont réalisées.

- Sur le premier ¼ de cycle, la contrainte $X(s)$ évolue progressivement de la fonction nulle à une fonction dont les variations sont similaires à celle simulées (au point 8) en DDD (voir figure 34 du chapitre 1). On remarque que les dislocations « bloquées » à cause d'une contrainte à courte distance élevée (s > 100 MPa) présentent une contrainte à longue distance élevée (–90 MPa), agissant dans le *même* sens que la contrainte appliquée.
- Sur le second ¼ de cycle, on remarque que la contrainte $X(s)$ commence à se modifier pour les dislocations présentant des s faibles. A déformation nulle (point 22), on obtient un profil en dents de scie identique à celui observé sur la figure 34 du chapitre 1.
- Sur le troisième ¼ de cycle, on remarque que l'on revient au point 26 dans une configuration équivalente au point 8, et le quatrième ¼ de cycle est identique au second ¼ de cycle.

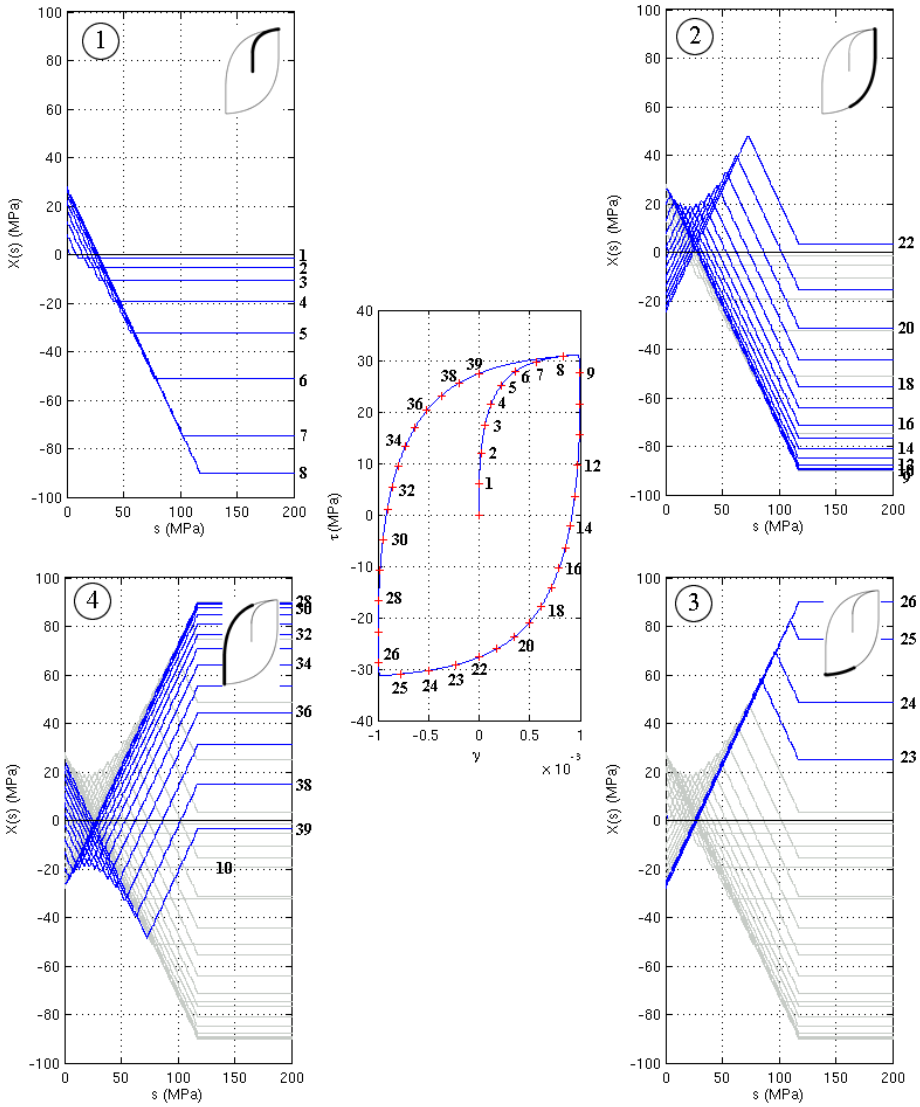
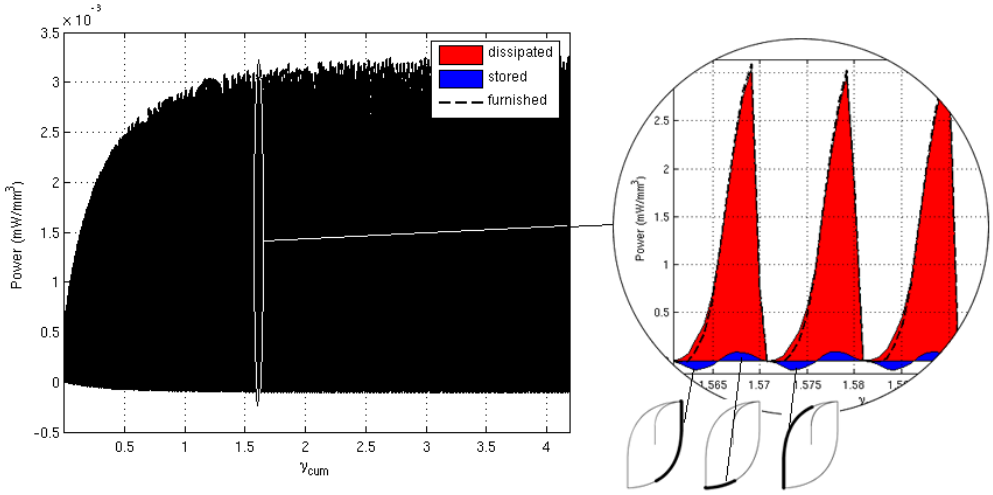


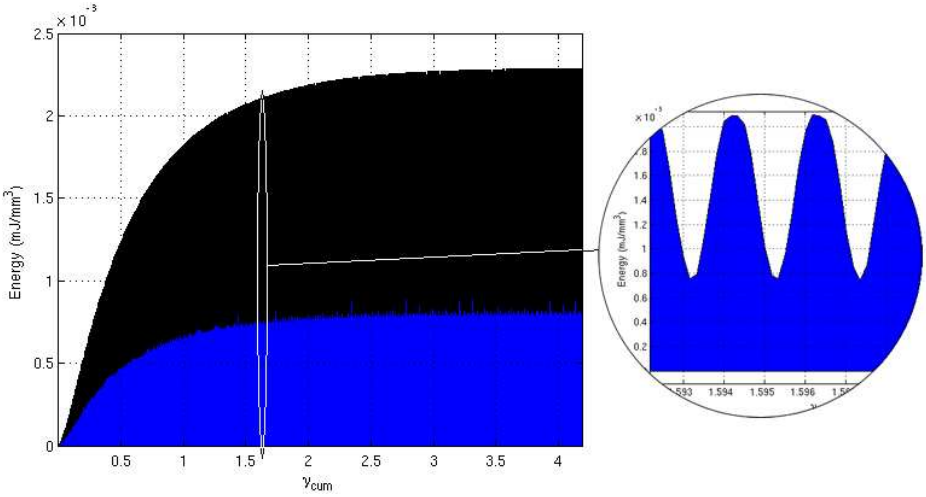
fig. 11 Evolution de la contrainte interne à longue distance $X(s)$ sur $4 \times ¼$ cycle.

3.3 BILAN ENERGETIQUE

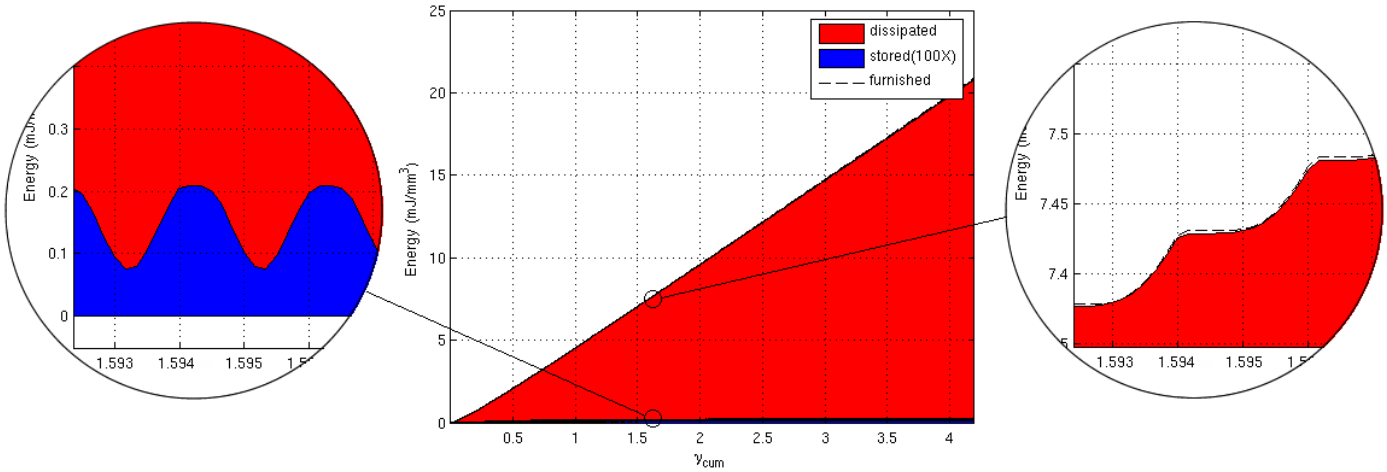
La figure 12(a) présente l'évolution des puissances instantanées en fonction de la déformation plastique cumulée. Le zoom sur un cycle permet de mettre en évidence l'équilibre des puissances fournies, dissipées et stockées. On note par ailleurs la forte part de puissance dissipée, mais aussi les transferts d'énergie stockée à chaque cycle. Au début d'une décharge, la microstructure rend une partie de l'énergie stockée à la charge précédente ($P_{\text{stockée}} < 0$), puis en stocke à nouveau jusqu'à la fin de la décharge. Le phénomène est reconduit au demi-cycle suivant et ainsi de suite. Par intégration de la puissance stockée, on observe sur la figure 12(b) que l'énergie rendue à chaque décharge est légèrement inférieure à l'énergie stockée à chaque charge, ce qui se traduit par une accumulation lente d'énergie stockée dans le cristal. A titre indicatif, la figure 12(c) porte l'évolution des énergies fournies, dissipées et stockées. On constate la faible part d'énergie stockée par le monocristal en rapport à la part dissipée.



(a) Puissances instantanées en fonction de γ_{cum}



(b) Energie stockée en fonction de γ_{cum}



(c) Energies fournie, dissipée (rouge) et stockée (bleu) en fonction de γ_{cum}

fig. 12 Evolution des grandeurs énergétiques

3.4 DISCUSSION

Il semble important de rapprocher la modélisation effectuée ci-dessus avec celle proposée par Saint Venant il y a longtemps (voir la figure 13) [**Lemaitre** *et* **Chaboche** 04] et reprise plus récemment par Mroz [**Mroz** 69] qui la généralise à des trajets de chargement plus complexes. Le concept reste en effet le même : on observe un comportement conditionné par des contraintes internes notées σ_{si} variant suivant un spectre allant de 0 à +∞ qui bloquent (par frottement) la déformation plastique avec plus ou moins d'intensité, ce qui stocke une énergie élastique (via les ressorts E_i) variable, fonction des contraintes internes qui ont été surpassées.

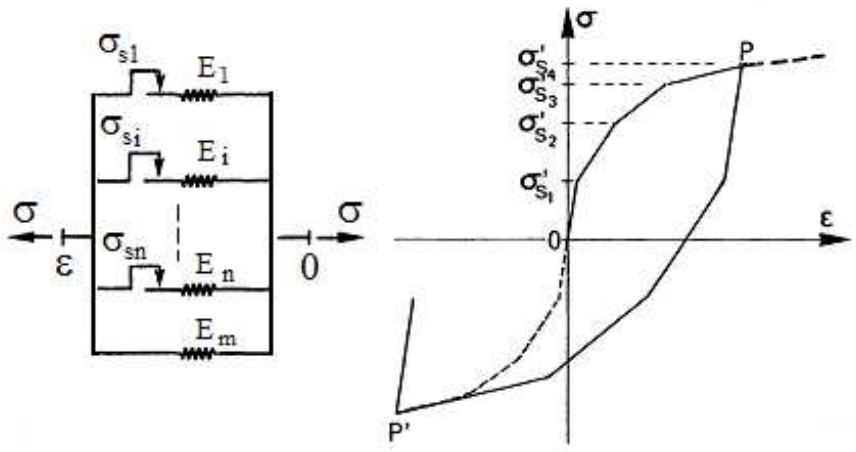


fig. 13 Modélisation du solide élasto-plastique, selon St Venant [**Lemaitre** *et* **Chaboche** 04].

La modélisation réalisée dans cette thèse se rapproche en tous points de cette modélisation élémentaire, l'analogie pouvant en effet être faite ainsi :

$$\sigma_{si} \leftrightarrow f_\rho(s_i)s_i$$

$$E_i \leftrightarrow M_\rho\mu + \mu$$

On notera toutefois les points suivants :

- la dernière branche (E_m) sur le dessin de la figure 13 est inexistante dans le modèle de plasticité cristalline, puisque l'on a montré que $\lim_{s\to+\infty} f_\rho(s) = \lim_{s\to+\infty} \exp(-s) = 0$ et donc que $\lim_{s\to+\infty} f_\rho(s)\, s = 0$,
- le pilotage en déformation totale du modèle comme le sous-entend le dessin de la figure 13 n'est pas trivial à mettre en place, dans le sens où l'on ne connaît pas à priori, pour un incrément de déformation donné, la déformation à laquelle chaque patin sera soumis.

Cette dernière remarque souligne en effet un point critique du modèle présenté dans ce chapitre, qui se pilote difficilement en déformation plastique imposée. En effet, les équations (1) à (6) s'intègrent facilement connaissant un incrément de cission $\Delta\tau$. On utilise alors successivement les équations (1)-(6) pour calculer $\dot{\gamma}_p(s)$ puis on remonte à $\dot{\overline{\gamma}}_p$. L'inverse n'est pas évident dans le sens où la donnée de $\dot{\overline{\gamma}}_p$ ne

renseigne pas sur la valeur des déformations locales $\dot{\gamma}_p(s)$, le lien étant un lien de sommation $\dot{\overline{\gamma}}_p = \int_0^{+\infty} f_\rho(s)\, \dot{\gamma}_p(s)\, ds$.

4 EXTENSION DU MODELE AU GLISSEMENT MULTIPLE

4.1 VARIABLES D'ETAT

L'extension est directement construite en reprenant les principes énoncés ci-dessus en glissement simple. Dans le cas d'un cristal CFC qui présente 12 systèmes de glissement actifs, les variables d'états représentant la microstructure sont les suivantes :

- $\rho^{(i)}$: densité de dislocations sur le système n°i ;
- $f_\rho(s^{(i)})$: densité de probabilité classant les dislocations du système n°i par valeurs de leur cission d'activation $s^{(i)}$;
- $s^{(i)}$: éventail des cissions d'activation des dislocations du système n°i, variant entre 0 et $+\infty$;
- $X(s^{(i)})$: éventail des cissions à longue distance s'exerçant sur les dislocations du système n°i ; on suppose que l'on a toujours une fonctionnelle *biunivoque* entre la cission à courte distance sur le système n°i et la cission à longue distance sur ce même système. On note toutefois que quelques simulations en DDD sur 12 systèmes de glissement montre une tendance à rendre la fonctionnelle plus floue. Cet effet est le témoin de l'existence d'une interaction entre systèmes, qui pourrait potentiellement s'exprimer par une fonctionnelle à plusieurs variables, qui se noterait $X^{(k)}(s^{(i)})$: la contrainte à longue distance sur les dislocations du groupe $s^{(k)}$ du système n°k pourrait dépendre des contraintes à courte distance $s^{(i)}$ des dislocations du système n°i. L'étude qui préciserait ce point n'a pas abouti dans cette thèse, des fonctionnelles simples ne semblant pas exister.
- $\gamma_p(s^{(i)})$: déformation de cisaillement suivant le plan de glissement du système n°i.

Les équations qui établissent le lien entre ces variables sont simplement extrapolées des équations du tableau 1.

4.2 REECRITURE DES EQUATIONS

Description de la microstructure à un instant *t*	Variable d'état :	$\rho^{(i)} — f_\rho(s^{(i)}) — s^{(i)} — X(s^{(i)}) — \gamma_p(s^{(i)})$
	Loi d'état :	$f_\rho(s^{(i)}) = \frac{1}{\bar{s}^{(i)}} \exp\left(-\frac{s^{(i)}}{\bar{s}^{(i)}}\right)$ (1)
		$\bar{s}^{(i)} = \mu b \sqrt{\alpha_{ik} \rho^{(k)}}$ (2)
		$X(s^{(i)}) = M_\rho \, \mu \left(\gamma_p(s^{(i)}) - \bar{\gamma}_p^{(i)}\right)$ (3)
Evolution de la microstructure à un instant *t*	Loi d'évolution	$\dot{\rho}^{(i)} = \frac{1}{b}\left(\frac{\sqrt{a_{ik} \rho^{(k)}}}{K} \times \text{sign}(P_{\text{stockée}}) - 2 y_c \rho^{(i)}\right) \lvert \dot{\bar{\gamma}}_p^{(i)} \rvert$ (4)
Ecoulement plastique à un instant *t*	Loi d'écoulement *locale*	$\dot{\gamma}_p(s^{(i)}) = \dot{\gamma}_0 \left\lvert \frac{\tau^{(i)} - X(s^{(i)})}{\tau^* + s^{(i)}} \right\rvert^{\frac{1}{m}} \text{sign}\left(\tau^{(i)} - X(s^{(i)})\right)$ (5)
	Loi d'écoulement *globale*	$\dot{\bar{\gamma}}_p^{(i)} = \int_0^{+\infty} f_\rho(s^{(i)}) \, \dot{\gamma}_p(s^{(i)}) \, ds^{(i)}$ (6)
Evolution énergétique à un instant *t*	Puissance fournie	$\sum_{i=1}^{12} \tau^{(i)} \times \dot{\bar{\gamma}}_p^{(i)}$
	Puissance dissipée	$\sum_{i=1}^{12} \int_0^{\infty} f_\rho(s^{(i)}) \, (\tau^* + s^{(i)}) \times \dot{\gamma}_p(s^{(i)}) \, ds^{(i)}$
	Puissance stockée	$\sum_{i=1}^{12} \int_0^{\infty} f_\rho(s^{(i)}) \, X(s^{(i)}) \times \dot{\gamma}_p(s^{(i)}) \, ds^{(i)}$

Tableau 2 : Modélisation micromécanique d'un VER CFC en glissement *multiple*.

4.3 REMARQUES

L'interaction entre les différents systèmes de glissement est prise en compte via des matrices d'interaction symétriques. Il s'agit de la matrice d'écrouissage $\boldsymbol{\alpha}$ et de la matrice de production des dislocations **a**. Dans le cas où l'on souhaiterait intégrer une interaction (probable mais à priori de faible intensité) entre systèmes de glissement au niveau des contraintes à longue distance, le paramètre M_ρ pourrait être remplacé par une matrice $\mathbf{M}_\rho$. Actuellement, en supposant que l'interaction est faible, la matrice $\mathbf{M}_\rho$ est prise comme une matrice diagonale : $\mathbf{M}_\rho = M_\rho \, \mathbf{I}$.

La matrice d'interaction $\boldsymbol{\alpha}$ proposée initialement par [**Franciosi** 84] présente l'allure suivante :

	B4	D4	C1	D1	B5	C5	D6	A6	B2	A2	C3	A3
B4	α_0	α_{1col}	α_3	α_2	α_{1copl}	α_2	α_2	α_3	α_{1copl}	α_2	α_{1orth}	α_{1orth}
D4		α_0	α_2	α_{1copl}	α_2	α_3	α_{1copl}	α_2	α_2	α_3	α_{1orth}	α_{1orth}
C1			α_0	α_{1col}	α_2	α_{1copl}	α_2	α_3	α_{1orth}	α_{1orth}	α_{1copl}	α_2
D1				α_0	α_2	α_3	α_{1copl}	α_2	α_{1orth}	α_{1orth}	α_3	α_2
B5					α_0	α_{1col}	α_{1orth}	α_{1orth}	α_{1copl}	α_2	α_3	α_2
C5						α_0	α_{1orth}	α_{1orth}	α_3	α_2	α_{1copl}	α_2
D6							α_0	α_{1col}	α_2	α_3	α_2	α_3
A6								α_0	α_2	α_{1copl}	α_2	α_{1copl}
B2				Sym.					α_0	α_{1col}	α_2	α_3
A2										α_0	α_2	α_{1col}
C3											α_0	α_{1col}
A3												α_0

Elle appartient à une espace vectoriel de dimension 6, les matrices de base classant les systèmes par types d'interaction qui sont au nombre de 6 dans le réseau CFC et les projections α_0, α_{1col}, … α_3 donnant leur intensité. On distingue en particulier :

- trois interactions « avec la forêt » entre les systèmes de glissement non-coplanaires, ce qui produit la formation des jonctions glissiles α_2 ou sessiles α_3 (verrous Lomer-Cottrell) et verrous de Hirth α_{1ortho},
- deux interactions sans contact, qui concerne des dislocations qui se glissent sur des plans de glissement parallèles (auto-interaction α_0 et interaction coplanaire α_{1copla}),
- une interaction dite colinéaire α_{1coli} qui intervient entre les dislocations de même Burgers qui se déplacent sur deux plans de glissement différents, passant de l'un à l'autre par glissement dévié.

De nombreuses études en DDD publiées [**Fivel** *et al.* 98, **Kubin** *et al.* 08] fournissent des valeurs de ces 6 coefficients indépendants.

α_0	α_{1col}	α_{1copl}	α_{1orth}	α_2	α_3
0,122	0,625	0,122	0,07	0,137	0,122

Tableau 3 : Valeurs des coefficients de la matrice d'interaction $\boldsymbol{\alpha}$ [**Kubin** *et al.* 08].

La matrice **a** qui entre dans la définition de la loi de production de dislocations est construite sur la même structure que la matrice de Franciosi. Dans les modélisations en glissement multiple réalisées dans cette thèse, cette matrice est prise diagonale avec l'affectation de la valeur 1 au coefficient a_0. Toutefois plusieurs valeurs des coefficients de la matrice **a** sont proposés dans la littérature [**Fivel** *et al.* 98].

a_0	a_{1col}	a_{1copl}	a_{1orth}	a_2	a_3
0,03	0,4	0,4	0,4	0,75	1

Tableau 4 : Valeurs des coefficients de la matrice d'interaction **a** [**Fivel** *et al.* 98].

5 CONCLUSION

La modélisation présentée dans ce chapitre est construite sur les bases des analyses de contraintes internes dans la microstructure de dislocations réalisée au chapitre 1 en Dynamique des Dislocations Discrète. Elle fait apparaître un système de 6 équations qui établissent un lien entre des variables décrivant l'état de la microstructure. Ces variables sont la densité de dislocations, mais aussi le spectre des contraintes à courte distance s'exerçant sur les dislocations qui permet de grouper les dislocations par classe de comportement. On réduit par ce concept la dimension numérique du problème de plasticité par rapport à une simulation en DDD qui intègre un à un tous les segments de dislocations responsables de la plasticité. Le modèle présente par ailleurs un bilan énergétique équilibré. Par ailleurs, l'analyse globale des équations montre finalement qu'il présente une analogie forte avec le modèle très ancien proposé par Saint-Venant. Il en est toutefois une extension puisqu'il explicite ses coefficients phénoménologiques par des paramètres physiques identifiés dans la microstructure de dislocations.

6 ANNEXES

6.1 ANNEXE 1- LOI D'ECOULEMENT LOCALE

Une dislocation donnée de longueur δl dans un VER de volume V subit les cissions suivantes :

- une cission appliquée au VER, notée τ ;
- une cission créée par la microstructure dans le proche voisinage, notée $s \cdot \text{sign}(v)$, qui s'oppose localement à son mouvement (i.e. à sa vitesse v) ;
- une cission créée par la microstructure éloignée, notée $X(s)$, qui peut s'opposer ou aider le mouvement de la dislocation ;

Elle peut bouger à la vitesse v si la somme de ces cissions est au moins égale à une cission critique notée τ^*, qui dépend de la température :

$$\tau^* = \tau - X(s) - s \cdot \text{sign}(v) \qquad \text{(A)}$$

La théorie de l'activation thermique précise que la vitesse v de la dislocation est liée à τ^* par :

$$v = b\nu_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{kT}\right) 2\text{sh}\left(\frac{\tau^* \Delta V^*}{kT}\right) \qquad \text{(B)}$$

où k est la constante de Boltzmann, T la température (°K), ν_D la fréquence de Debye, b le vecteur de Bürgers, ΔV^* et ΔG_0 sont respectivement le volume d'activation mis en jeu et l'énergie stockée lors du franchissement. Ce déplacement à la vitesse v induit un taux de déformation plastique $\dot{\gamma}$ pour le VER, selon :

$$\dot{\gamma} = \frac{bv\delta l}{V}$$

Pour une cission τ^* modérée, la probabilité de saut inverse en négligeable, et on a alors :

$$\dot{\gamma} = \frac{b^2 \nu_D \delta l}{V} \exp\left(\frac{-\Delta G_0 + \tau^* \Delta V^*}{kT}\right) \qquad \text{(C)}$$

En considérant que $\tau^* << s$, on peut effectuer un développement limité de l'exponentielle, ce qui donne :

$$\dot{\gamma} \cong \frac{b^2 \nu_D \delta l}{V} \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{kT}\right)\left(1 + \frac{\tau^*}{s}\frac{s\Delta V^*}{kT}\right) \cong \frac{b^2 \nu_D \delta l}{V} \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{kT}\right)\left(1 + \frac{\tau^*}{s}\right)^{\frac{s\,\Delta V^*}{kT}}$$

Soit encore, en notant $\dot{\gamma}_0 = \frac{b^2 \nu_D \delta l}{V} \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{kT}\right)$ et $m = \frac{kT}{s\,\Delta V^*}$, on obtient : $\dot{\gamma} \cong \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau - X(s)}{s}\right)^{\frac{1}{m}}$

Pour prendre en compte des trajets de chargements s'inversant dans lesquels $\tau - X(s)$ peut devenir négatif, on modifie la loi par :

$$\dot{\gamma} \cong \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau - X(s)}{s} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sign}\left(\tau - X(s)\right) \qquad \text{(D)}$$

Remarque :

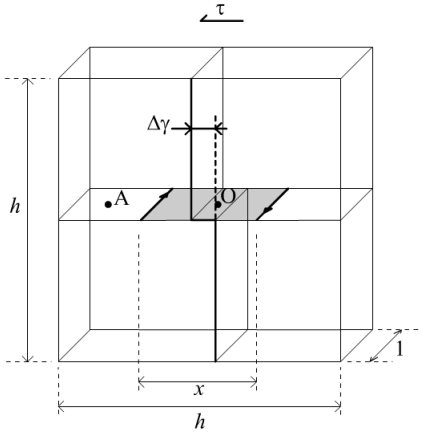
- on remarque que cette loi suppose $\tau^* << s$. Or il arrive parfois que la dislocation se trouve dans un environnement isolé, sans proche voisin tel que $s \cong 0 < \tau^*$. Dans ce cas, le mouvement n'est possible que si $\tau^* \cong \tau - X(s)$. Comme τ^* est en général petit, l'expression (C) indique que le glissement à lieu, à la vitesse environ égale à $\dot{\gamma}_0 = \frac{b^2 \nu_D \delta l}{V} \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{kT}\right)$. Par conséquent, la formule (D) peut être modifiée pour prendre en compte tout le spectre de s (à priori de 0 à $+\infty$) :

$$\dot{\gamma} \cong \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau - X(s)}{\tau^* + s} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sign}\left(\tau - X(s)\right) \qquad \text{(E)}$$

- on remarque que l'exposant $1/m$ dépend de s. L'exposant est donc très faible, voir nul si $s = 0$, ce qui signifie que le fluage est automatique même à température nulle. Comme l'exposant aussi est construit à partir de l'hypothèse $\tau^* << s$, on prendra cet exposant constant pour tout s, avec une valeur minimale valant $1/m = \frac{\tau^* \Delta V^*}{kT}$.

6.2 ANNEXE 2 - LOI D'ETAT PILOTANT LA CONTRAINTE A LONGUE DISTANCE

Considérons deux dislocations rectilignes de longueur unitaire émises par une source située au point O sur la figure ci-contre. Elles ont balayé dans leur mouvement une aire $A = 1x = x$, ce qui engendre une hétérogénéité de déformation plastique entre le point O et le point A valant :



$$\Delta\gamma = \frac{bA}{V} = \frac{bx}{h^2}$$

où $V = 1h^2 = h^2$ est le volume du VER considéré. Cette hétérogénéité induit naturellement une contrainte en retour X qui n'est autre que la contrainte d'interaction entre les deux segments :

$$X = -M\frac{\mu b}{x}$$

Une variation de position dx d'un des segments provoque une variation de contrainte en retour dX et une variation d'hétérogénéité d$\Delta\gamma$ qui valent :

$$\mathrm{d}X = M\frac{\mu b}{x^2}\mathrm{d}x \qquad \text{et} \qquad \mathrm{d}\Delta\gamma = \frac{bA}{V} = \frac{b\mathrm{d}x}{h^2}$$

En conséquence, le lien qui unit dX à d$\Delta\gamma$ est de la forme :

$$\mathrm{d}X = M\mu\frac{h^2}{x^2}\,\mathrm{d}\Delta\gamma$$

En général, la distance entre les dislocations dans une microstructure réelle est proportionnelle à l'inverse de la densité, ce qui s'écrit :

$$x = \frac{K}{\sqrt{\rho}}$$

Par conséquent, on a :

$$\mathrm{d}X = \frac{Mh^2}{K}\rho\ \mu\ \mathrm{d}\Delta\gamma \qquad \text{noté encore} \qquad \mathrm{d}X = M_\rho\ \mu\ \mathrm{d}\Delta\gamma$$

avec M_ρ un coefficient valant dans cette démonstration $\frac{Mh^2}{K}\rho$. Par integration, on a :

$$\boxed{X = M_\rho\ \mu\ \Delta\gamma}$$

De façon plus générale, cette formule s'étend à la modélisation construite dans le présent chapitre. Toute dislocation appartenant à la classe des dislocations ayant une contrainte à courte distance s présente une contrainte à longue distance $X(s)$ et s'associe à une déformation plastique locale $\gamma_p(s)$ *a priori* différente de la déformation plastique globale $\overline{\gamma_p}$. Dans ces conditions, on lie $X(s)$ à l'hétérogénéité $\gamma_p(s) - \overline{\gamma_p}$ par :

$$X(s) = M_\rho\ \mu\ \left(\gamma_p(s) - \overline{\gamma_p}\right)$$

Le coefficient M_ρ présente un caractère phénoménologique, avec une probable dépendance linéaire à la densité de dislocation ρ.

CHAPITRE 3

Analyse des performances du modèle physique

SOMMAIRE

1 INTRODUCTION 85

2 SIMULATION DES CHARGEMENTS CYCLIQUES 85

2.1 PREPARATION DES SIMULATIONS 85

2.2 ALLURE GENERALE DES CYCLES 86

2.3 ANALYSE DE L'ECROUISSAGE CYCLIQUE 87

2.4 ANALYSE DE L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE 90

2.5 INFLUENCE DE LA DISTRIBUTION $F_p(s)$ SUR L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE 91

2.6 INFLUENCE DU PARAMETRE M_p SUR L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE 94

2.7 CONCLUSION 95

3 SIMULATION DES CHARGEMENTS MONOTONES 96

4 CONCLUSION 98

1 INTRODUCTION

Ce chapitre a pour objectif d'exposer les performances et les limites de la modélisation proposée au chapitre 2 et construite à partir des analyses des contraintes internes réalisées en Dynamiques des Dislocations au chapitre 1. Deux cas de chargement sont simulés : cycliques et monotones, avec un jeu de paramètres correspondant à un monocristal de cuivre. Le but des chargements cycliques est de mettre en évidence l'apport de la modélisation physique construite dans cette thèse en termes d'écrouissage cinématique : toute la gamme d'amplitude de déformation plastique imposée allant de $\pm 10^{-5}$ jusqu'à $\pm 10^{-2}$ est reproduite correctement par le modèle sans avoir recours à un réajustement des paramètres. Les simulations en chargement monotone montrent par ailleurs que la modélisation effectuée est aussi pertinente à grandes amplitudes de déformation, toujours sans rien changer aux paramètres. Le chapitre est construit en 4 parties principales.

- On procède d'abord aux simulations en chargement cyclique. Pour chaque caractéristique observée, une comparaison simulation – expérience est menée. La référence bibliographique utilisée est l'article de Mughrabi de 1978 [**Mughrabi** 78], qui contient de nombreux résultats d'expériences menées avec soin sur le comportement du cuivre en chargement cyclique.
- L'analyse des performances de la modélisation en chargement cyclique est alors scindée en deux parties : on étudie d'une part les capacités du modèle à reproduire correctement les évolutions en amplitude de la cission, d'autre part ses aptitudes à reproduire correctement la forme des cycles, prouvant ainsi la gestion correcte de l'écrouissage cinématique.
- Les différences modèle – expérience sont mises en évidences et leurs causes identifiées afin de préciser les pistes de recherche futures à mener.
- Enfin, quelques simulations en chargement monotone sont présentées.

2 SIMULATION DES CHARGEMENTS CYCLIQUES

2.1 PREPARATION DES SIMULATIONS

Les simulations effectuées dans ce paragraphe doivent représenter le comportement d'un monocristal de cuivre. Les paramètres utilisés à ces fins sont présentés dans le tableau 1. Le commentaire principal concerne la matrice d'écrouissage cinématique $\mathbf{M}_\rho$, dont les valeurs sont considérées dans un premier temps constantes et indépendantes de la densité ρ. On aborde dans le paragraphe 2.6 les raisons qui font que ce choix est discutable, la prise en compte de la sensibilité des paramètres de la matrice à la densité pouvant être une piste pour l'amélioration de la précision du modèle.

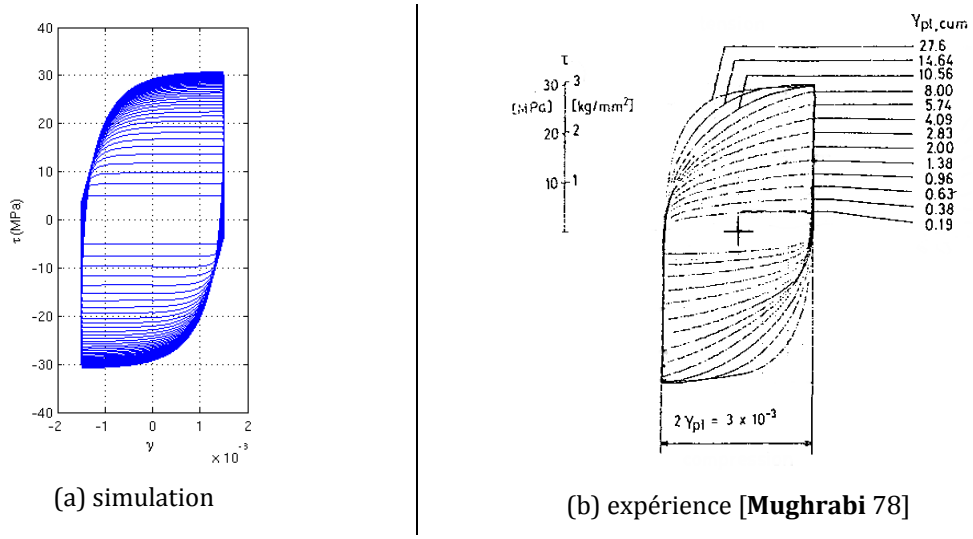
μ : module d'élasticité en cisaillement	μ = 45 000 MPa
K : nombre moyen d'obstacles avant arrêt	K = 350
b : norme du vecteur de Bürgers	$b = 0{,}25 \cdot 10^{-9}$ m
y_c : distance d'annihilation de deux dislocations coins	$y_c = 2 \cdot 10^{-9}$ m
$\boldsymbol{\alpha}$: Matrice d'écrouissage de Franciosi	$\alpha_0 = 0{,}122$ $\alpha_{1col} = 0{,}625$ $\alpha_{1cop} = 0{,}122$ $\alpha_{1ort} = 0{,}07$ $\alpha_2 = 0{,}135$ $\alpha_3 = 0{,}122$
$\mathbf{M}_\rho$: Matrice d'écrouissage cinématique	$\mathbf{M}_\rho = M_{\rho 0}\,\mathbf{I}$ avec $M_{\rho 0} = M_0 = 2$
$\mathbf{a}$: Matrice de production de dislocations	$\mathbf{a} = a_0\,\mathbf{I}$ avec $a_0 = 1$
τ^* : friction de réseau	τ^* = 4 MPa
m : coefficient de sensibilité à la vitesse	m = 0,05
$\dot{\gamma}_0$: taux de déformation de référence	$\dot{\gamma}_0 = 10^{-10}$ s^{-1}
$f_\rho(s)$: densité de probabilité gérant la répartition des cissions critiques s	en général *exponentielle*, mais aussi distribution de Rayleigh ou distribution Log-Normale

Tableau 1 : paramètres utilisés dans les équations du modèle.

*(**I** : matrice identité)

2.2 ALLURE GENERALE DES CYCLES

Une manière de caractériser la performance générale du modèle est de comparer courbe à courbe les boucles d'hystérésis caractéristiques des métaux en chargement cyclique. Cette comparaison est proposée en figure 1 pour un chargement en *glissement simple* à amplitude de déformation plastique imposée de $\pm 1{,}5 \cdot 10^{-3}$ obtenu en traction-compression sur une éprouvette correctement orientée (l'axe de traction est suivant la direction $[\bar{1}\ 2\ 3]$ du cristal).



(a) simulation

(b) expérience [**Mughrabi** 78]

fig. 1 Comparaison modèle – expérience du comportement mécanique sous une sollicitation cyclique d'amplitude $\Delta\gamma/2 = \pm 1{,}5 \cdot 10^{-3}$.

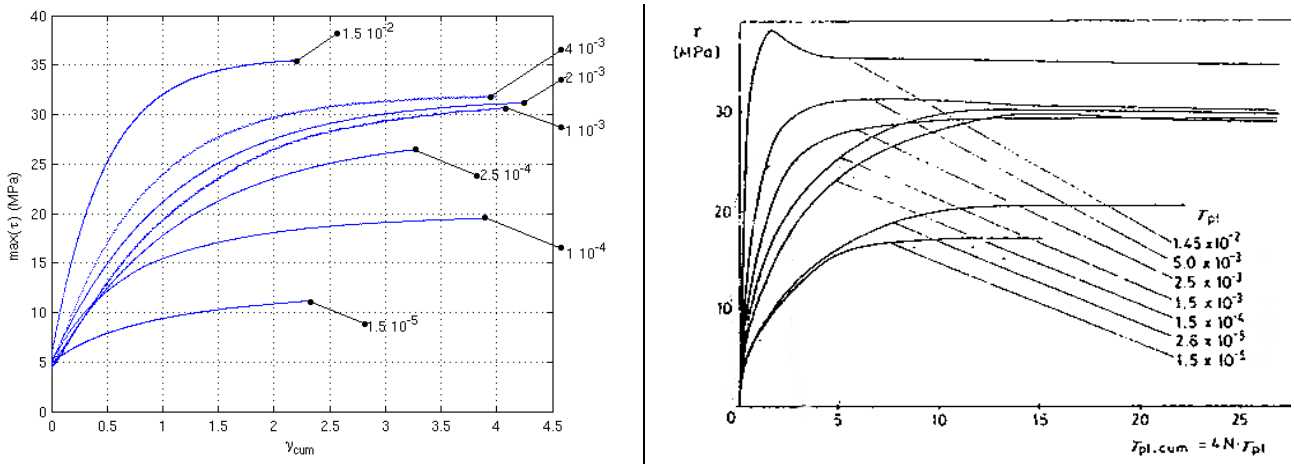
On remarque que les cycles évoluent en taille et en forme, avec des allures comparables en première analyse. Le comportement converge vers un cycle dit « cycle à saturation » ou « cycle stabilisé ». La valeur de l'amplitude est bien obtenue sur le cycle à saturation qui présente un maximum de cission à environ 30MPa. La comparaison des amplitudes cycle à cycle pour la phase transitoire allant du premier cycle jusqu'au cycle à saturation est réalisée au paragraphe suivant (§2.3), de façon plus aisée en traçant la courbe d'écrouissage cyclique. Concernant la forme des cycles, elle est correcte globalement et met en évidence les points suivants :

- les premiers cycles sont presque rectangulaires, témoignant d'un faible écrouissage cinématique au début de la déformation plastique,
- la forme des cycles évolue de façon progressive de la forme initiale vers la forme du cycle à saturation, ce dernier témoignant d'un effet Bauschinger marqué.

Cette mise en activation progressive de l'écrouissage cinématique est étudiée plus en détail aux paragraphes 2.4 et suivant à l'aide d'indicateurs mathématiques plus pertinents que la simple observation.

2.3 ANALYSE DE L'ECROUISSAGE CYCLIQUE

La déformation plastique cyclique génère une augmentation progressive de la cission nécessaire à la déformation plastique qui se constate par la taille du cycle et se mesure par le maximum de cission atteint au cours du cycle. Pour mettre en évidence cet effet, on reporte les différentes valeurs maximales atteintes au cours des différents cycles en fonction de la déformation cumulée. La figure 2 présente les courbes simulées et expérimentales pour différentes amplitudes de déformation plastique imposée, de 10^{-5} jusqu'à 10^{-2}.



(a) simulation (b) expérience [**Mughrabi** 78]

fig. 2 Courbes d'écrouissage cyclique $max(\tau_{/cycle}) = f(\gamma_{cum})$.

On constate que les courbes expérimentales convergent systématiquement vers une cission à saturation τ_{sat} qui est fonction de l'amplitude de déformation plastique $\Delta\gamma$ imposée. Cet effet est correctement reproduit en simulation.

On constate que la vitesse (en termes de déformation plastique cumulée) pour atteindre la contrainte à saturation est d'autant plus faible expérimentalement que la déformation plastique imposée est grande. Cet effet est reproduit par les simulations, avec toutefois une tendance à saturer un peu plus vite que pour

l'expérience. Cet effet pourrait être corrigé en modifiant légèrement la valeur des paramètres K et y_c de la loi de production de dislocations. Cet effet de ralentissement de l'écrouissage cyclique dans le cas des faibles amplitudes de déformations plastique imposées est un effet direct de la modification de la loi de production de dislocations opérée au paragraphe 2.5 du chapitre 2 (équ. (7)). Cette dernière permet en effet d'obtenir une production nette de dislocations plus faible aux petites amplitudes de déformation plastique imposée en permettant une réversibilité plus marquée de la production à chaque cycle. La production de dislocations pour deux amplitudes de déformations plastique ($\pm 1 \cdot 10^{-3}$ et $\pm 1 \cdot 10^{-5}$) est tracée à titre indicatif sur la figure 3 pour montrer cet effet.

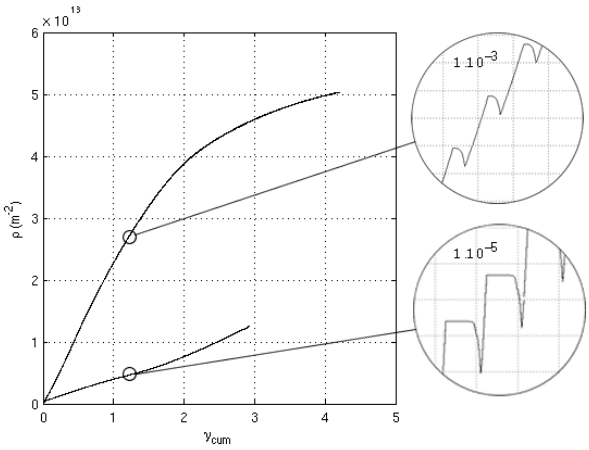
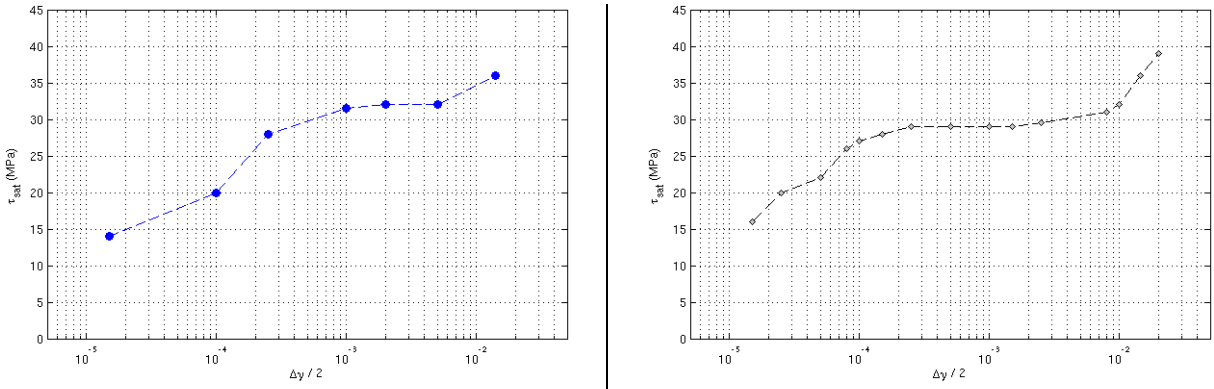


fig. 3 Simulation de l'influence de l'amplitude de la déformation plastique sur la production de dislocations sur le système primaire.

Expérimentalement, les plus grands taux de déformation plastique imposée ($\sim 10^{-2}$) présentent un taux d'écrouissage rapide suivi d'un adoucissement cyclique d'autant plus manifeste que l'amplitude est forte. La modélisation ne reproduit pas cet effet puisque par construction le durcissement est dans le modèle une variable croissante, celui-ci étant directement lié à la densité de dislocations qui est une fonction (globalement) croissante saturante. De nombreux auteurs attribuent cet adoucissement à la mise en place dans la microstructure de sous-structures très efficaces (bandes de glissement persistantes en barreau d'échelle). D'autres auteurs considèrent que cet adoucissement est plutôt la conséquence d'un durcissement initial trop important, induit par un manque initial de dislocations pour accommoder toute la déformation plastique imposée. Dans tous les cas, il s'agit d'un phénomène assez spécifique qui n'est pas restituable par le présent modèle physique construit sur l'hypothèse d'un comportement statistique moyen qui n'est pas en mesure de capter cette finesse du comportement réel.

Enfin on constate que les courbes expérimentales comprises entre $1{,}5 \cdot 10^{-4}$ et $5 \cdot 10^{-3}$ convergent toutes vers la même contrainte à saturation ($\sim$ 30 MPa). Cet effet se visualise clairement sur la courbe contrainte-déformation cyclique de la figure 4 où est reportée la cission à saturation τ_{sat} en fonction de l'amplitude de déformation plastique imposée $\Delta\gamma$. On constate l'existence d'un plateau très caractéristique sur les monocristaux CFC. Ce plateau est plutôt bien reproduit avec la simulation. L'origine physique de ce palier est pour de nombreux auteurs [**Mughrabi** 78, **Differt** *et* **Essmann** 93] attribuée aux bandes de glissement intenses (vues comme des sous-structures molles) et à leur multiplication lorsque la

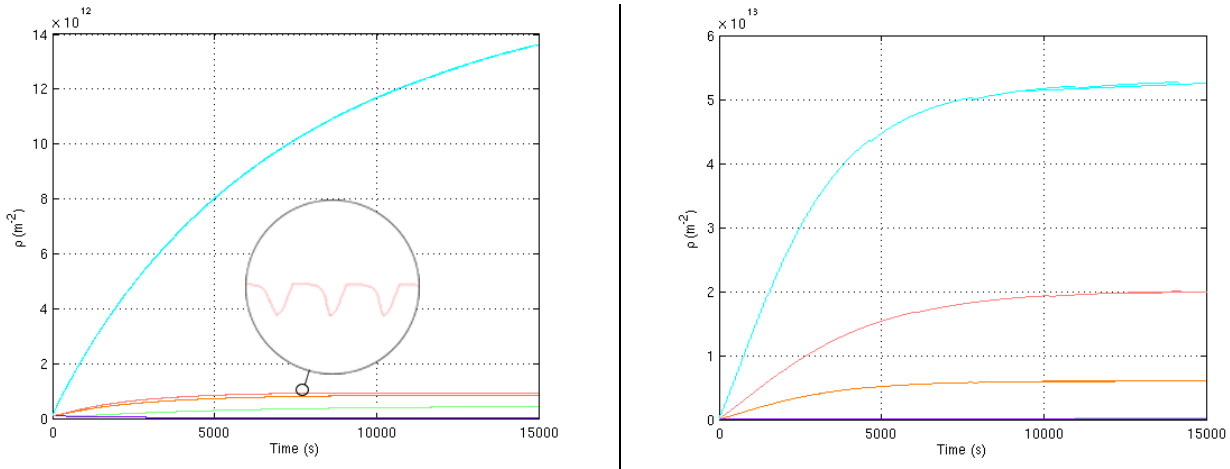
déformation plastique imposée augmente. Dans la simulation le plateau est toutefois reproduit sans que ce type de comportement soit intégré à la modélisation.



(a) simulation (b) expérience [**Mughrabi** 78]

fig. 4 Courbe contrainte-déformation cyclique $\tau_{sat} = f(\Delta\gamma)$.

Le plateau est délimité par deux zones : la zone des faibles amplitudes [$10^{-5} \rightarrow 2{\cdot}10^{-4}$] et celle des fortes amplitudes [$> 5{\cdot}10^{-3}$]. On constate en simulation que pour la gamme de déformation $10^{-5} \rightarrow 5{\cdot}10^{-3}$, un seul système de glissement est activé (voir figure 5(a)), tandis qu'au delà de $5{\cdot}10^{-3}$, un second système s'active lorsqu'on est en traction-compression sur une éprouvette d'axe [$\bar{1}$ 2 3] (figure 5(b)). La non-apparition des systèmes pour la gamme des faibles amplitudes est une conséquence directe de la modification de la loi de production de dislocations qui assure la réversibilité de la production lorsque la déformation plastique imposée est très faible (voir paragraphe 2.5 du chapitre 2).



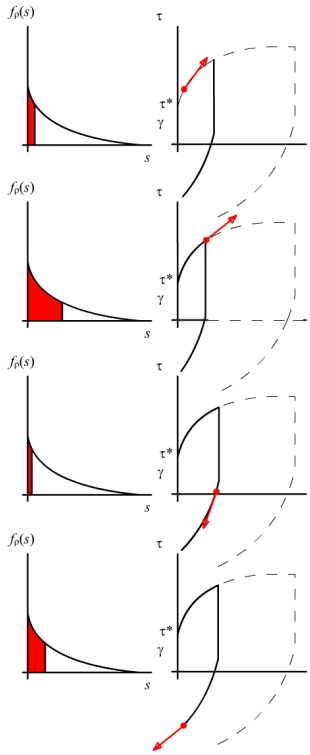
(a) $\Delta\gamma = \pm 1{\cdot}10^{-3}$: on note que la densité sur les systèmes secondaires sature très vite, par effet de réversibilité

(b) $\Delta\gamma = \pm 1{,}5{\cdot}10^{-2}$: on a une production nette sur tous les systèmes de glissement

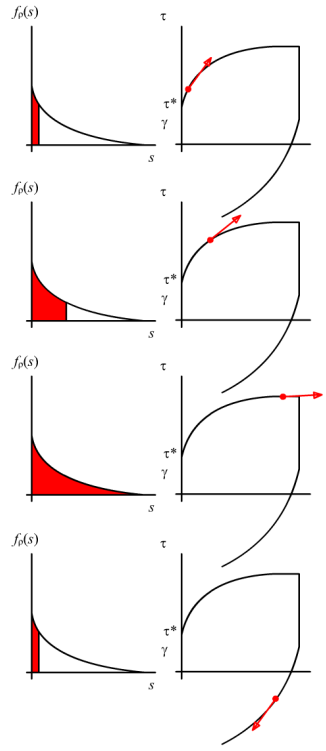
fig. 5 Production de dislocations sur les systèmes de glissement.

Les faibles contraintes à saturation qui caractérisent les amplitudes de la gamme $10^{-5} \rightarrow 2{\cdot}10^{-4}$ sont toutefois plus la conséquence d'un écrouissage cinématique que celle d'un écrouissage isotrope. En effet, pour toute la gamme d'amplitudes allant jusqu'à $5{\cdot}10^{-3}$, la densité de dislocations à saturation sur le système primaire est sensiblement la même ($\sim 10^{13}$ m^{-2}), ce qui conduit à des distributions $f_\rho(s)$ très ressemblantes. Pourtant la contrainte maximale atteinte dans un cycle est plus faible lorsque l'amplitude de déformation plastique imposée est faible. Ceci s'explique par le fait qu'à faible amplitude, une

proportion réduite de dislocations suffit pour accommoder la déformation plastique imposée. Au contraire, à forte amplitude, tout le spectre doit être mobilisé. On comparera les figures 6(a) et 6(b) qui illustrent ce propos.



(a) faible amplitude imposée : seule une partie de la microstructure est mobilisée pour accommoder la déformation plastique (cas des sollicitations de la gamme $10^{-5} \rightarrow 2{\cdot}10^{-4}$)



(b) grande amplitude imposée : toute la microstructure est mobilisée pour accomoder la déformation plastique (cas des sollicitations de la gamme $10^{-3} \rightarrow 10^{-2}$)

fig. 6 Lien entre la quantité de dislocations mobilisée (en rouge) et la forme du cycle.

Ce paragraphe met en évidence les capacités du modèle à reproduire les variations d'amplitudes de la cission en fonction de la déformation plastique imposée. Le paragraphe suivant est dédié à l'analyse de la forme des boucles d'hystérésis et à leur évolution avec la déformation plastique.

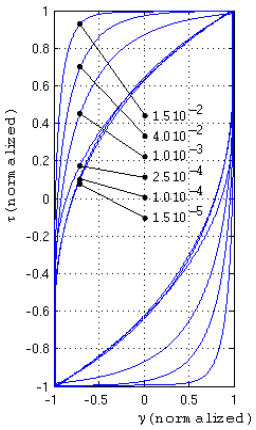
2.4 ANALYSE DE L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE

La forme des boucles d'hystérésis est en évolution continue entre le premier cycle et le cycle à saturation. On constate expérimentalement (figure 7(b)) que la forme des cycles à saturation est variable en fonction de l'amplitude de déformation plastique imposée. Pour les faibles amplitudes de déformation plastique imposée, les cycles présentent un effet Bauschinger très marqué qui est bien reproduit par la simulation. Aux grandes amplitudes, c'est le contraire : le cycle ressemble de plus en plus à un rectangle avec un effet Bauschinger plus discret.

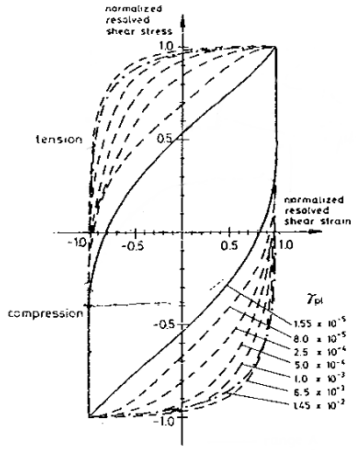
L'évolution de la forme du cycle au cours d'un essai est formellement représenté par le suivi du paramètre de forme V_H (défini au paragraphe 3.1 du chapitre 2). Les courbes expérimentales de la figure 8(b) témoignent d'un V_H de plus en plus faible lorsque l'amplitude de déformation plastique décroit (ce qui signifie des effets d'écrouissage cinématique de plus en plus importants). Globalement, cet effet est décrit en simulation, avec des ordres de grandeur de V_H corrects. On remarque toutefois que le paramètre V_H,

sauf pour les cas à $2{,}5{\cdot}10^{-5}$ de déformation ou pour les grandes déformations de l'ordre de 10^{-2}, présente une évolution non-monotone : il est décroissant dans un premier temps, passe par un minimum puis croit à nouveau pour atteindre la saturation. Cet effet n'est pas du tout reproduit dans la simulation, ce qui témoigne d'une lacune dans la description de la microstructure et de son hétérogénéité. Afin d'analyser ce défaut, on s'intéresse dans les paragraphes suivants successivement aux deux paramètres ayant une influences sur l'écrouissage cinématique :

- la fonction densité de probabilité $f_\rho(s)$,
- le paramètre M_ρ (ou la matrice diagonale $\mathbf{M}_\rho$) qui entre dans la loi d'état gérant la contrainte interne à longue distance $X(s)$.

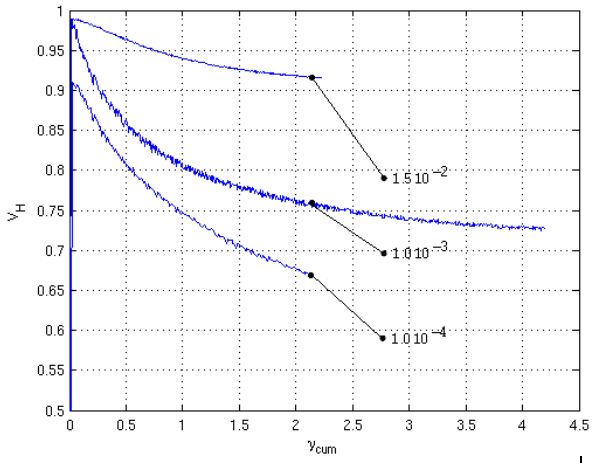


(a) modélisation

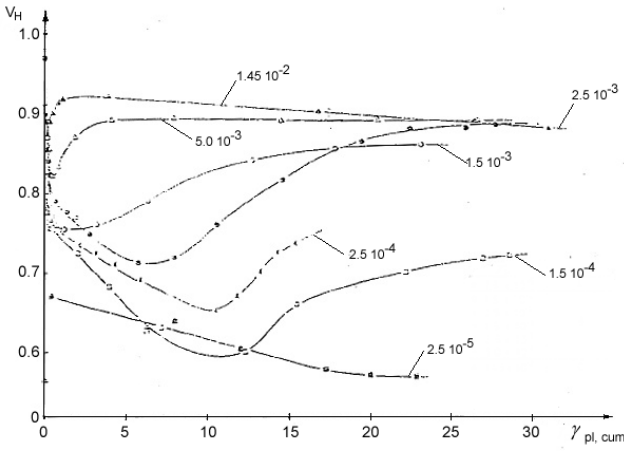


(b) expérience (Mughrabi 78]

fig. 7 Analyse de la forme des boucles des cycles *à saturation* pour différentes amplitudes de déformation plastique. La forme est comparée par une représentation de la contrainte et de la déformation *normalisée* par leurs maximums.



(a) modélisation



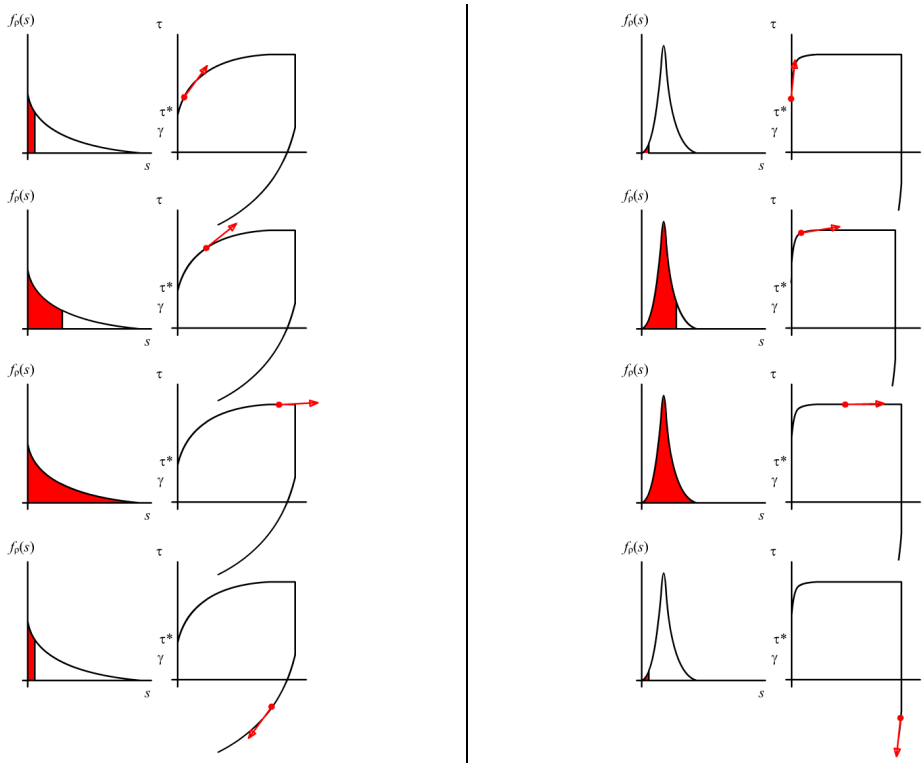
(b) expérience

fig. 8 Evolution du paramètre de forme V_H en fonction de γ_{cum}, pour différentes amplitudes de déformation plastique imposée.

2.5 INFLUENCE DE LA DISTRIBUTION $f_\rho(s)$ SUR L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE

Pour une densité donnée, la forme d'un cycle est *partiellement* conditionnée par la forme de la densité de probabilité qui précise l'état local de la microstructure en termes de contrainte d'activation des

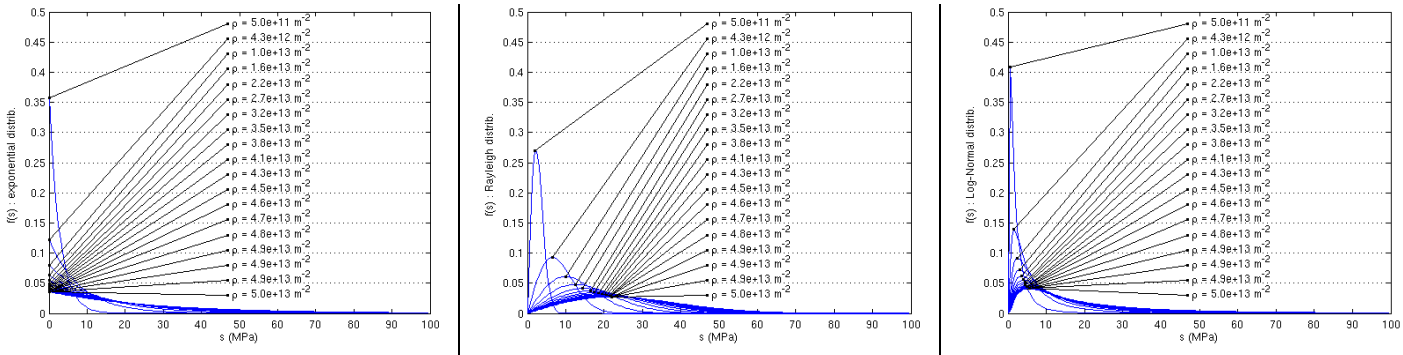
dislocations. La représentation schématique de la figure 9, sur laquelle la même déformation plastique est imposée sur deux microstructures décrites avec deux lois de distribution f_ρ différentes mais de même moyenne, permet d'appréhender cet effet.



(a) forme d'un cycle avec la loi 1 (écart type grand) (b) forme d'un cycle avec la loi 2 (écart-type faible)

fig. 9 Lien entre le module d'écrouissage et la fonction de distribution $f_\rho(s)$.

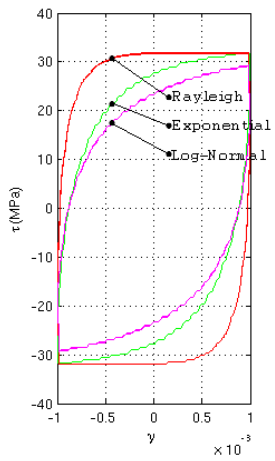
L'effet est illustré sans difficulté avec la modélisation construite au chapitre 2 : il suffit pour cela de remplacer la distribution exponentielle par un autre type de distribution, soit connue soit réalisée « sur-mesure ». Les distributions de Rayleigh et Log-Normales ont par exemple été testées (figure 10). Cette recherche de nouvelles distributions est motivée par le fait que la distribution exponentielle suggérée à partir des études en DDD à des chances de ne plus être applicable pour des densités plus grandes, comme le suggère l'analyse simpliste de microstructure 2D faite au paragraphe 2.7.1 du chapitre 2.



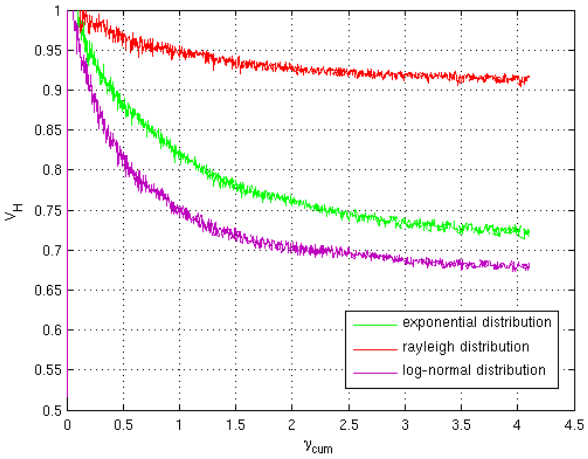
(a) distribution exponentielle (b) distribution de Rayleigh (c) distribution Log-Normale

fig. 10 Différentes évolutions possibles de la densité de probabilité f_ρ .

La forme du cycle à saturation ainsi que l'évolution du paramètre V_H est donnée sur les figures respectives 11(a) et 11(b) pour les trois distributions. On note que la loi la plus hétérogène est la loi Log-normale, qui est établie en prenant un rapport écart-type/moyenne de $\sqrt{2}$, conformément aux constats réalisés au chapitre 2, paragraphe 2.7.1. Pour la loi exponentielle et la loi de Rayleigh, ces rapports valent respectivement 1 et 0,52 par construction.



(a) Comparaison de la forme des boucles d'hystérésis à *saturation*



(b) Evolution du paramètre de forme V_H en fonction de γ_{cum}

fig. 11 Analyse de la forme des boucles pour différentes distributions f_ρ.

Le constat est élémentaire : une microstructure décrite par une distribution hétérogène engendre plus d'écrouissage cinématique, ce qui est logique puisque cette fonction est à l'origine même de l'hétérogénéité de comportement de la microstructure dans la modélisation physique présentée. Choisir différemment la définition de la fonction f_ρ est donc une opération possible pour faire varier à souhait l'écrouissage cinématique d'un monocristal. Ce choix ne permet toutefois pas d'obtenir une évolution de V_H décroissante puis croissante, sauf à disposer d'une loi dont l'écart-type augmenterait puis diminuerait à nouveau. Si au premier abord cette hypothèse peut sembler à écarter au vu des simulations DDD et 2D réalisées, elle pourrait paraître plausible au regard des observations MET des microstructures sous forte densité. Celles-ci présentent en effet une apparence souvent très organisée dans les métaux CFC (murs à forte densité de dislocations et canaux à faible densité) [**Mughrabi** 75], qui laisserait croire à une microstructure constituée de deux populations de dislocations, celles qui sont bloquées (en grand nombre) et celles qui sont très mobiles (en plus faible proportion). La distribution pourrait alors ressembler schématiquement à celle de la figure 12 et fournir un écrouissage cinématique faible expliquant la remontée du paramètre V_H à mi-durée de vie.

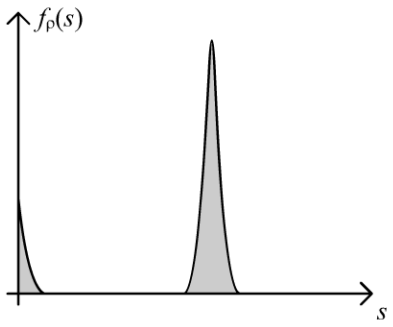


fig. 12 Représentation schématique de la distribution f_ρ pour une microstructure en mur – canaux.

Toutefois, la question de la stabilité de ces structures en murs et canaux a été remise en question par [**Gaudin** 02]. Ces auteurs ont montré au MET dans l'Inox 316L que les murs étaient fortement déstabilisés à chaque changement du sens du chargement dans un cycle, ce qui produirait sur la fonction f_ρ une forte perturbation et en tout cas augmenterait son écart-type. A partir de ces constats, il n'est pas possible actuellement de conclure quand à la responsabilité *totale* de la distribution f_ρ dans la forme de l'écrouissage cinématique.

Par ailleurs, si l'hétérogénéité de la microstructure a un effet évident sur l'écrouissage cinématique, un autre paramètre a également son importance : c'est l'énergie élastique stockée par les déformations élastiques qui restaurent l'incompatibilité de la déformation plastique dans la microstructure. Techniquement dans le modèle présenté, c'est la loi gérant l'évolution de la contrainte à longue distance en fonction des déformations locales :

$$X(s) = M_\rho \mu \left(\gamma_p(s) - \overline{\gamma_p} \right)$$

au moyen du paramètre M_ρ.

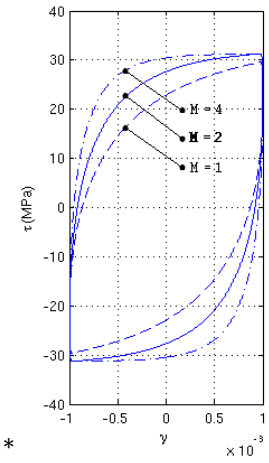
2.6 INFLUENCE DU PARAMETRE M_ρ SUR L'ECROUISSAGE CINEMATIQUE

L'origine de ce paramètre n'est pas complètement justifiée dans la modélisation présentée dans cette thèse. Ce paramètre est très probablement dépendant de la densité de dislocations, en intégrant aussi bien les effets de l'hétérogénéité de la déformation plastique que les effets de tensions de ligne. Au premier niveau, ce paramètre est pris constant, en général égal à environ 2, cette valeur ayant été identifiée à l'aide d'une simple simulation DDD (voir annexe 2). Son influence sur la forme du cycle est donnée, dans le cas d'un paramètre M_ρ constant ($M_\rho = M = cste$), sur la figure 13. On constate que l'augmentation du paramètre diminue la manifestation de l'écrouissage cinématique. Ceci s'interprète par le fait que, sous une cission appliquée τ, les dislocations dont la cission critique d'activation vaut s, voient une contrainte à longue distance $X(s)$ d'environ $\tau - s$, ce qui induit un stockage d'énergie élastique au maximum égal à :

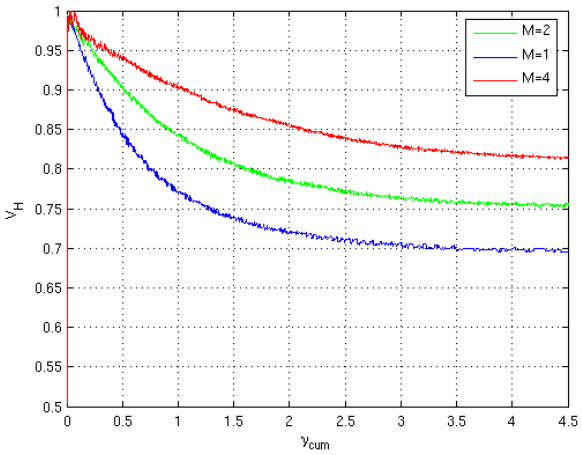
$$E = \frac{1}{2}\frac{X(s)^2}{M\mu} = \frac{1}{2}\frac{(\tau - s)^2}{M\mu}$$

Ce stockage est d'autant plus faible que M est grand. On constate également que choisir différemment le paramètre M_ρ est une opération possible pour faire varier à souhait l'écrouissage cinématique d'un

monocristal. On constate également de façon évidente que la variation de M en tant que constante ne permet pas d'obtenir des variations de V_H décroissantes puis croissantes comme expérimentalement, sauf à prendre un M_ρ faible puis croissant avec la densité.



(a) comparaison de la forme des boucle d'hystérésis à *saturation*



(b) Evolution du paramètre de forme V_H en fonction de γ_{cum}

fig. 13 Analyse de la forme des boucles pour différents coefficients M_ρ .

C'est ce qui est réalisé sur la figure 14, avec un coefficient M_ρ variant linéairement avec la densité de dislocations ρ, selon :

$$M_\rho = 2\frac{\rho}{\rho_{ref}}$$

où ρ_{ref} est une densité de référence prise ici égale à la densité à saturation ($\sim 5 \cdot 10^{13}$ m^{-2}). Une évolution de ce type traduit bien l'effet de décroissance puis croissance, avec une distribution f_ρ exponentielle fixée.

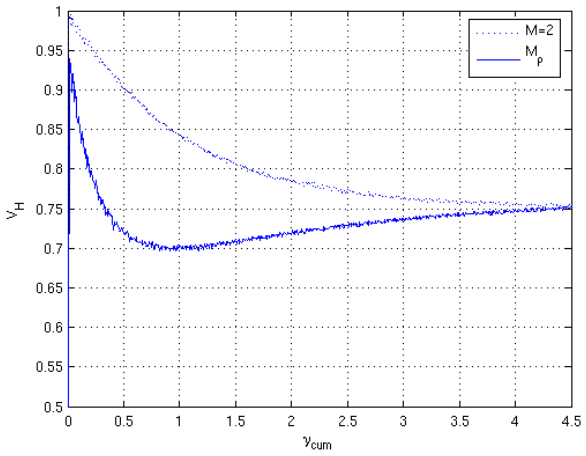


fig. 14 Effet d'un coefficient M_ρ évolutif (f_ρ est une loi exponentielle).

2.7 CONCLUSION

On constate que la modélisation physique construite au chapitre 2 possède un degré de pertinence certain vis-à-vis de sa capacité à décrire mathématiquement (par une représentation spectrale) une microstructure de dislocations et à reproduire des effets logiques sur le comportement mécanique en

fatigue, comparables en tous cas à ceux décrits expérimentalement. Toutefois, si la suite d'équations du tableau 1 du chapitre 2 donne une représentation mathématique efficace pour simuler la plasticité d'une microstructure de cristal CFC, elle n'en reste pas moins semi-phénoménologique, de part les incertitudes concernant les paramètres à la base de la description de l'hétérogénéité de la microstructure, f_ρ et M_ρ. La recherche future pour exploiter ce travail serait d'améliorer la connaissance de ces paramètres, en tentant de répondre aux questions suivantes.

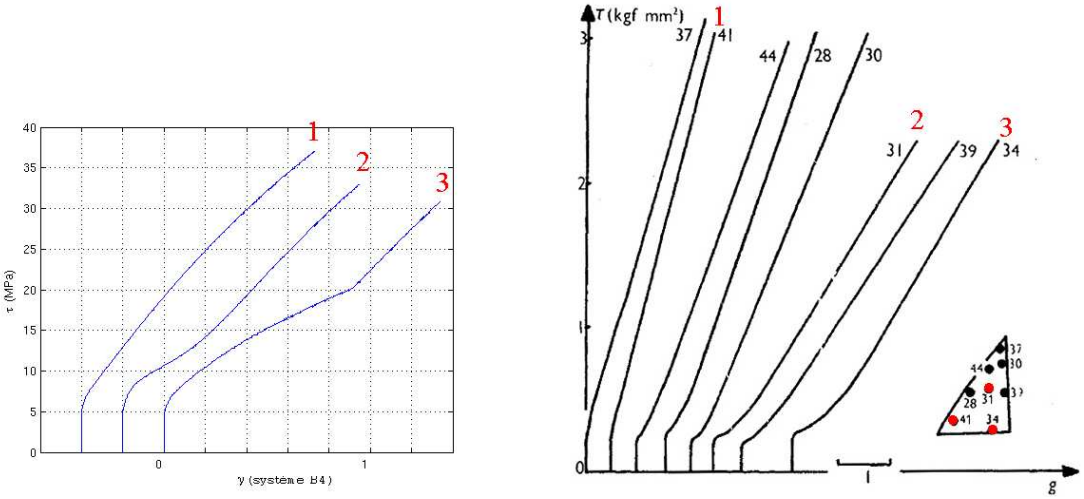
- La forme de f_ρ : est-ce une loi connue, ou une loi arbitraire fortement biaisée lors de l'apparition de telle ou telle sous-structure (qui permettrait dans ce cas éventuellement de simuler l'adoucissement cyclique …) ?
- Allant de pair avec la recherche de la bonne fonction f_ρ, y-a-t-il une définition différente de la loi d'état[12] $\sigma_s = f(\bar{s})$. Actuellement, dans le cas d'une distribution exponentielle, on a par construction $\sigma_s = \bar{s}$.
- Quelle est la forme de la loi $M_\rho = f(\rho)$?

3 SIMULATION DES CHARGEMENTS MONOTONES

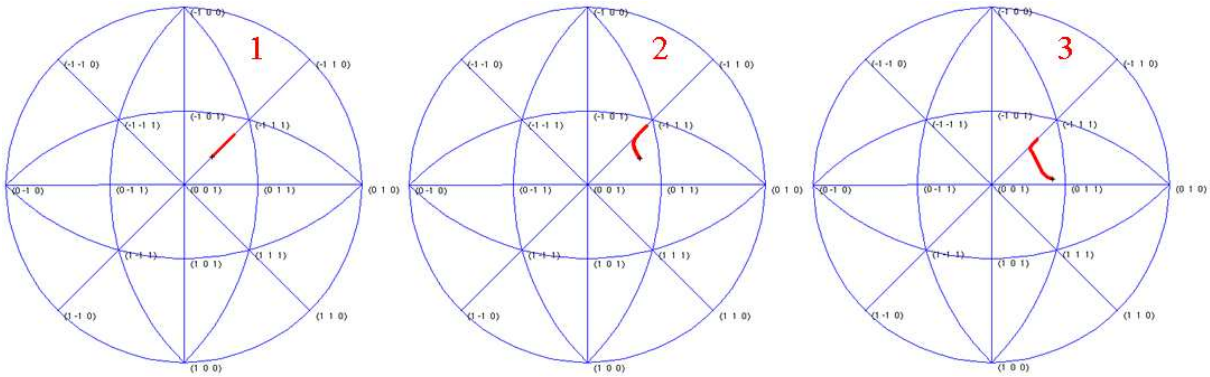
La traction monotone d'un monocristal CFC est en général caractérisée par des courbes présentant des stades distincts, témoins des activations successives des systèmes de glissement induites par la rotation de l'éprouvette qui modifie les rapports des cissions résolues sur les systèmes de glissement (voir figure 15(c)). On donne ci-dessous sur la figure 15(a) trois simulations de la traction d'un monocristal de cuivre, orienté dans les directions respectives [$\bar{1}$ 1 3], [$\bar{1}$ 2 3] et [$\bar{1}$ 11 14]. Les paramètres utilisés sont les mêmes pour les trois simulations, et les mêmes que ceux qui ont servi pour les simulations en fatigue présentés ci-dessus.

On constate une allure générale correcte, faisant apparaître des stades distincts. Le suivi de la direction de traction sur la figure 15(b) montre dans le cas 2 une activation progressive du glissement secondaire, phénomène qui en général est assez mal reproduit par les modèles physiques de plasticité existants actuellement. Cette activation prématurée est possible car le modèle fait toujours apparaître, sur tous les systèmes de glissement, des dislocations dont la cission d'activation est faible si l'on considère une loi de distribution f_ρ exponentielle.

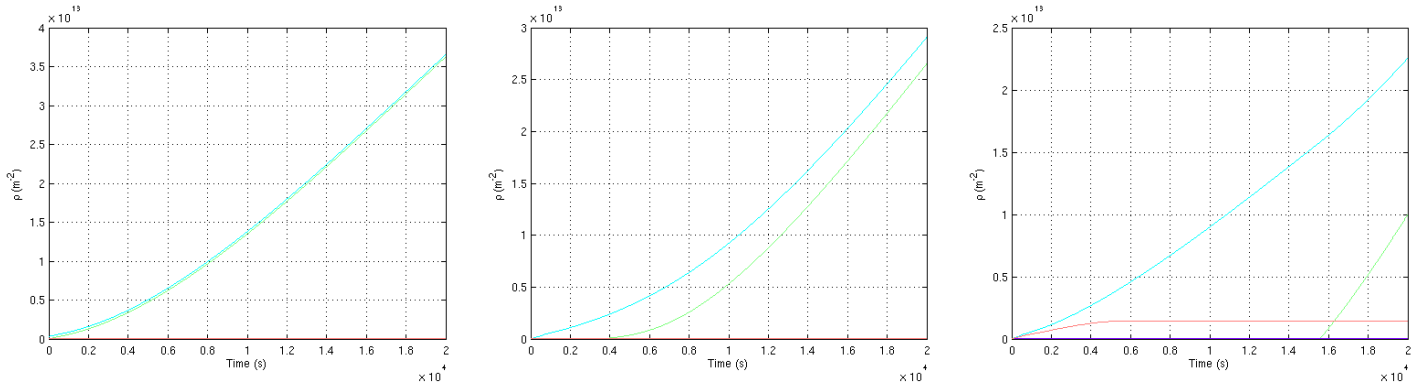
[12] L'écart-type sur s est noté σ_s ; la moyenne sur s est notée $\bar{s}$.



(a) Comportement mécanique du système B4 en traction monotone d'un monocristal de cuivre pour différentes orientations. Expérience tirée de [**Jaoul** 08].



(b) suivi de l'axe de l'éprouvette sur la projection stéréographique



(c) Evolution de la densité sur les systèmes de glissement

fig. 15 Validation de la modélisation en trajet monotone.

4 CONCLUSION

Ce chapitre a mis en évidence le potentiel de la modélisation construite au chapitre 2 sur des bases physiques établies à partir de simulations en Dynamique des Dislocations au chapitre 1. La modélisation fournit :

- une méthode efficace pour décrire une microstructure de dislocations en intégrant son hétérogénéité par une description spectrale,
- une manière efficace de répercuter cette description sur le comportement mécanique par des lois d'état et d'écoulement adaptées,
- un système d'équations mathématiques qui, avec un jeu de paramètres *fixés* ayant un sens semi-physique (ou semi-phénoménologique !), permet de simuler correctement toute la gamme d'amplitude de déformation plastique imposée, de $\pm 10^{-5}$ en fatigue, à plus de 100 % en monotone.

Ce sont ces deux caractéristiques qui le distinguent des autres modèles existants.

Enfin, de nombreuses pistes de recherche sur les microstructures de dislocations sont suggérées avec précision grâce à ce travail.

SYNTHESE ET PERSPECTIVES

Le travail présenté dans ce mémoire a pour objectif de renforcer notre compréhension de la plasticité des métaux à petite échelle et de proposer une modélisation en cohérence avec cette perception. Cette étape s'avère indispensable pour d'une part faire évoluer les modèles de plasticité cristalline qui ont atteint un plateau quant à leurs performances, d'autre part proposer à terme des évolutions de la modélisation au niveau macroscopique dont la seule tendance actuelle est d'enrichir les modèles en augmentant leur degré de liberté par un nombre toujours croissant de paramètres. Un des points en ligne de mire est clairement de trouver une origine physique claire à l'écrouissage cinématique pour en proposer une modélisation qui soit physiquement fondée.

Grâce à l'outil de simulation numérique DDD qui restitue un comportement collectif des dislocations à partir de leur propriété comportementale individuelle (DDD), quelques traits inédits de l'évolution des dislocations au sein des microstructures qui se développent au cours de la déformation sont révélés.

La microstructure exerce sur une dislocation des contraintes à courte et longue distance. Celles-ci exercent des actions concomitantes sur les dislocations.

- La contrainte à courte distance est corrélée à la contrainte seuil qu'il faut dépasser pour provoquer le glissement de la dislocation qui la subit. Cette contrainte n'est pas homogène mais distribuée au sein de la microstructure. Cette distribution semble de type exponentiel. D'un point de vue statistique, elle est complètement déterminée par la moyenne des résistances et leur écart type. L'aspect remarquable de cette catégorisation est donc qu'elle confère aux dislocations d'une même classe des comportements identiques.

- La contrainte à longue distance est quant à elle une contrainte supplémentaire qui vient s'ajouter à la contrainte appliquée pour soit favoriser le mouvement de la dislocation soit la freiner. Elle est produite par les différences de déformations qui se produisent entre deux classes de dislocations. Elle s'apparente donc à une contrainte cinématique en raison des effets sur le mouvement des dislocations : elle peut soit le favoriser, soit l'empêcher. Elle est principalement induite par la différence de déformation entre la déformation moyenne et la déformation de la classe de dislocations considérée.

La différence primordiale avec les représentations usuelles est donc qu'on reconnaît une importance particulière à l'hétérogénéité des contraintes seuil (à courte distance) : elle doit être prise en compte en raison de son incidence notable sur les propriétés mécaniques.

On exprime alors les lois d'écoulement relativement à une classe de dislocations : ainsi il faut déterminer pour chaque classe, la quantité éventuelle de glissement en relation avec sa propre contrainte seuil. Les quantités contrainte et déformation à l'échelle du VER sont calculées en effectuant respectivement la moyenne sur les contraintes seuil et la sommation de l'ensemble des glissements déterminés sur chaque

classe de dislocation par la loi d'écoulement. Pour chaque classe de dislocation, la contrainte à longue distance est déterminée par une relation d'incompatibilité plastique classique.

Dès lors, l'ensemble des phénomènes usuels liés à la plasticité se retrouvent et s'expliquent assez naturellement. Une représentation schématique du comportement rhéologique de ce modèle est donnée par le modèle de Saint Venant généralisé qui met en parallèle des systèmes de ressorts et patin plastique avec des seuils variables. La résolution du modèle est en fait réglée par le nombre de systèmes qui est en fait beaucoup plus important que dans les représentations usuelles proposées à des fins didactiques.

Le modèle proposé est appliqué à différentes situations expérimentales avec succès montrant la validité des hypothèses employées.

Ainsi validée, cette modélisation permet de considérer la plasticité sous un angle nouveau, ce qui amène différentes conséquentes importantes.

- Elle rend **indissociable** le durcissement **isotrope** et l'écrouissage **cinématique**. Jusqu'à présent, la plupart des ouvrages de référence présente l'écrouissage global comme la somme des deux écrouissages isotropes et cinématiques qui peuvent être activés indépendamment l'un de l'autre. Pour le modèle proposé, cette dissociation est impossible : l'un ne peut pas se construire sans l'autre.

- Elle explique clairement la physique qui se produit dans l'**écrouissage cinématique** et indique que celui-ci ne peut être reproduit finement sans tenir compte de la **distribution des contraintes seuil** et de l'activation successive et progressive des systèmes qui en découle. La différence de déformations qui en résulte est accommodée par des déformations élastiques qui stockent ainsi une fraction de l'énergie de déformation restituable au prochain changement de sens de chargement. Le modèle est ainsi apte à traiter des très petites déformations dans un cas de chargement alterné mais aussi de grandes déformations pour un chargement monotone.

- Ce modèle donne une vision très claire des mécanismes de stockage dans le cristal. Cette estimation est conforme avec les mesures expérimentales.

On voit que la base physique du comportement qui est proposée enrichit notre compréhension du comportement élastoviscoplastique du matériau. Le modèle proposé semble donc à cet égard complètement pertinent.

Différentes transpositions ou extensions sont alors concevables au niveau macroscopique.

- La limite élastique qui définit la transition élastoplastique n'a pas de raison d'être dans ce type de modélisation. En effet cette notion est valide au niveau local. Globalement, l'activité plastique se produit dès le début de la déformation. Ceci posé, on comprend alors la difficulté rencontrée lorsqu'on s'attache à mesurer un module élastique, particulièrement lorsque le matériau est recuit. Cette proposition peut être directement reprise au niveau macroscopique. Il n'est plus utile de rechercher une limite élastique puisque la déformation plastique débute dès les plus faibles contraintes. La déformation plastique s'obtient pour les petites déformations en retranchant la valeur de la

déformation élastique. Toute la difficulté est alors reportée sur l'identification du module d'Young qui doit être restreinte à la seule mesure de la pente à l'origine. Les réalignements de la machine de traction dans la phase de démarrage rendent cependant cette identification moins évidente qu'il n'y paraît. Tout autre protocole, comme la mesure d'une pente moyenne, entrainerait nécessairement des erreurs. La phase de caractérisation du matériau en vue de la simulation s'en trouve tout de même notablement simplifié pour une qualité de résultat qui n'en est pas moins bonne.

- Une nouvelle stratégie de simulation au niveau macroscopique est envisageable. En fait il y a un paradoxe à vouloir imposer une homogénéité de comportement sur l'ensemble du matériau dans la mesure où la méthode des éléments finis amène à résoudre un système où il y a autant de lois de comportement que de points d'intégration. Autrement dit, on dispose d'une caractéristique intéressante des codes éléments finis qui s'exploite sans surcoût. La proposition ici consiste alors à distribuer en chaque point d'intégrations un modèle avec des contraintes seuil variables selon une distribution exponentielle. Ce procédé permet alors avec des modèles simples de restituer avec une grande finesse des caractéristiques observées en plasticité : l'effet cinématique est reproduit avec une très bonne finesse. On retrouve par exemple également une localisation aléatoire de la striction pendant un essai de traction.

Les perspectives qui découlent de cette analyse sont alors naturelles.

Il s'agit de fiabiliser le modèle cristallin en continuant le travail de validation déjà entrepris au cours de cette thèse. Les calculs d'énergie pourraient être validés expérimentalement au laboratoire qui dispose d'une caméra thermique capable d'apporter l'information avec un degré de précision suffisant pour la validation.

Le travail de transposition au niveau macroscopique doit être complété. Il reste à déterminer les formes à donner à la loi à mettre en local. Les calculs ont été faits jusqu'à présent avec une simple loi bilinéaire avec des résultats très satisfaisant. Tout ceci doit être confirmé. Ce travail doit notamment être mis en œuvre dans le cadre de la réponse à un appel d'offre de la fédération aéronautique nationale. L'objectif est de proposer une loi capable de modéliser le comportement du titane, lequel comprend des systèmes de glissement très particuliers par rapport aux structures cubiques.

BIBLIOGRAPHIE

[Catalao *et al.* 05] S. Catalao, X.Feaugas, Ph. Pilvin, M.-Th. Cabrillat, *Dipole heights in cyclically deformed polycrystalline AISI 316L stainless steel.*, Materials Science and Engineering, vol. A 400-401, pp. 349-352, (2005).

[Chiu *et* Veyssière 08] Y. –L. Chiu, P. Veyssière, *Dislocation self-organisation under single slip straining and dipole properties.*, Materials Science and Engineering, vol. A 483-484, pp. 191-194, (2008).

[Cottrell 53] A. H. Cottrell, *Dislocations and plastic Flow in crystals.*, Oxford University Press, London, p111, (1953).

[Cuitino 96] A.M. Cuitino, *Effect of temperature and stacking fault energy on the hardening of FCC crystals.*, Materials Science and Engineering, vol. A 216, pp. 104-116, (1996).

[Déprés 04] C. Déprés, *Modélisation physique des stades précurseurs de l'endommagement en fatigue dans l'acier inoxydable austénitique 316L.*, Thèse, Institut National Polytechnique de Grenoble, (2004).

[Déprés *et al.* 04] C. Déprés, C. F. Robertson, M. C. Fivel, *Low-strain fatigue in AISI 316L steel surface grains: a three-dimensional discrete dislocation dynamics modelling of the early cycles I. Dislocation microstructures and mechanical behaviour.*, Philosophical Magazine, vol. 84, pp. 2257–2275, (2004).

[Déprés *et al.* 06] C. Déprés, C. F. Robertson, M. C. Fivel, *Low-strain fatigue in 316L steel surface grains: a three dimension discrete dislocation dynamics modelling of the early cycles. Part 2: Persistent slip markings and micro-crack nucleation*., Philosophical Magazine, vol. 86, pp. 79–97, (2006).

[Déprés *et al.* 08] C. Déprés, M. Fivel, and L. Tabourot, *A dislocation-based model for low-amplitude fatigue behaviour of face-centered cubic single crystals.*, Scripta Materialia, vol. 58, pp. 1086–1089, (2008).

[Differt *et* Essmann 93] K. Differt, U. Essmann, *Dynamic model of the wall structure in persistent slip bands of fatigued metals I. Dynamical model of edge dislocation walls.*, Materials Science and Engineering, vol. A164, pp. 295-299, (1993).

[Dimiduk *et al.* 05] D.M. Dimiduk, M.D. Uchic, T.A. Parthasarathy,*Size-affected single-slip behavior of pure nickel microcrystals.*, Acta Materialia, vol. 53, pp. 4065–4077, (2005).

[Essmann *et* Mughrabi 79] U. Essmann, H. Mughrabi, *Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities.*, Philos. Magazine, vol. A40, 731, (1979).

[Feaugas 99] X. Feaugas, *On the origin of the tensile flow stress in stainless steel AISI 316L at 300 K: back stress and effective stress.*, Acta Materialia, vol. 47, no. 13, pp. 3617-3632, (1999).

[Fivel 97] M. Fivel, *Etudes numériques à différentes échelles de la déformation plastique des monocristaux de structure CFC.*, Thèse, Institut Polytechnique de Grenoble, (1997).

[Fivel *et al.* 98] M. Fivel, L. Tabourot, E. Rauch, G. Canova, *Identification through mesoscopic simulations of macroscopic parameters of physically based constitutive equations for the plastic behaviour of fcc single crystals.*, J. Phys. IV France, vol. 8, pp. Pr8.151-Pr8.158, (1998).

[Franciosi 84] P. Franciosi, *Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : Modèlisation pour une chargement complexe quasi-statique.*, Thèse, Université de Paris-Nord, (1984).

[François *et al.* 91] D. François, A. Pineau, A. Zaoui, *Comportement mécanique des matériaux.*, Traité des Nouvelles Technologies, Hermès, Paris, (1991).

[Friedel 64] J. Friedel, *Dislocations.*, Pergamon Press, (1964).

[Gaudin 02] C. Gaudin, *Etude des mécanismes associés au rochet cyclique d'un acier austénitique AISI 316L.*, Thèse, Université de Technologie Compiègne, (2002).

[Gaudin *et* Feaugas 04] C. Gaudin, X. Feaugas, *Cyclic creep process in AISI 316L stainless steel in terms of dislocation patterns and internal stresses.*, Acta Materialia, vol. 52, pp. 3097-3110, (2004).

[Hahner *et al.* 98]P. Hahner, B. Tippelt, C. Holste, *On the dislocation dynamics of persistent slip bands in cyclically deformed fcc metals.*, Acta Materialia, vol. 46, no.14, pp. 5073-5084, (1998).

[Jaoul 08] B. Jaoul, *Etude de la plasticité et application aux métaux.*, Mines Paris ParisTech, Collection sciences de la matière, (2008).

[Kassner *et al.* 00] M.E. Kassner, M. -T. Pérez-Prado, K.S. Vecchio et M.A. Wall, *Determination of internal*

stresses in cyclically deformed copper single crystals using convergent-beam electron diffraction and dislocation dipole separation measurements., Acta Materialia, vol. 48, pp. 4247-4254, (2000).

[Kassner *et al.* 01] M.E. Kassner, M.A. Wall, M.A. Delos-Reyes, *Primary and secondary dislocation dipole heights in cyclically deformed cooper single crystals.*, Materials Science and Engineering, vol. A317, pp. 28–31, (2001).

[Kocks *et* Mecking 03] U.F. Kocks, H. Mecking, *Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case.*, Progress in Materials Science, vol. 48, pp. 171–273, (2003).

[Kubin *et al.* 08] L. Kubin, B. Devincre, T. Hoc, *Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals.*, Acta Materialia, vol. 56, pp. 6040-6049, (2008).

[Lemaitre *et* Chaboche 04] J. Lemaitre, J.-L. Chaboche, *Mécanique des matériaux solides.*, Cours 2éme cycle-Master - Ecoles d'ingénieurs, 2eme édition, (2004).

[Mroz 69] Z. Mroz, *An attempt to describe the behavior of metals under cyclic loads using a more general work hardening model.*, Acta Mechanica, vol. 7, pp. 199-212, (1969).

[Mughrabi 75] H. Mughrabi, *Description of the dislocation structure after unidirectional deformation at low temperatures.*, A.S. Argon (Ed.), Constitutive Equations in Plasticity, MIT Press, Cambridge, MA, (1975).

[Mughrabi 78] H. Mughrabi, *The cyclic hardening and saturation behaviour of cooper single crystals.*, Materials Science and Engineering, vol. 33, pp. 207-223, (1978).

[Mughrabi *et al.* 79] H. Mughrabi, F. Ackermann, K. Herz, *Persistent slip bands in fatigue face-centered and body-centered cubic metals.*, In: Fong J T (ed.) Fatigue Mecanisms, ASTM, Philadelphia, pp. 69-105, (1979).

[Mughrabi 83] H. Mughrabi, *Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals*., Acta Metall, vol. 31, pp. 1367-1379, (1983).

[Mughrabi 01] H. Mughrabi, *Self-consistent experimental determination of the dislocation line tension and long-range internal stresses in deformed copper crystals by analysisof dislocation curvatures.*, Materials Science and Engineering, A 309-310, pp. 237-245, (2001).

[Mughrabi *et* Pschenitzka 08] H. Mughrabi, F. Pschenitzka, *Stresses bow edge dislocation segment out of di-multipolar edge dislocation bundles.*, Materials Science and Engineering, vol. A 483-484, pp. 469-473, (2008).

[Peralta 08] P.D. Peralta, *Dislocation Structure and Cyclic Plasticity.*, Encyclopedia of Materials: Science and Technology, pp. 2222-2235, (2008).

[Polak 87] J. Polak, Resistivity of fatigue copper single crystals., Mat.. Sci. Engng., vol. 89, pp. 35-43, (1987).

[Robertson *et al.* 01] C. Robertson, M. Fivel and A. Fissolo, *Dislocation substructure in 316L stainless steel under thermal fatigue up to650 K.*, Mat.. Sci. Engng., vol. 315, pp. 45-57, (2001).

[Saada M45] G. Saada, *L'état métallique - Déformation plastique.*, Techniques de l'Ingénieur, M45.

[Suresh 01] S. Suresh, *Fatigue of Material.*, Cambridge University Press, (2001).

[Verdier *et al.* 98] M. Verdier, M. Fivel and I. Groma, *Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in f.c.c. metals: Principles and applications.*, Model. Simul. Mater. Sci. Engng., vol. 6, pp. 755-770, (1998).

ANALYSE DES CONTRAINTES INTERNES DANS LES MONOCRISTAUX CFC : VERS UNE NOUVELLE LOI DE PLASTICITE CRISTALLINE

L'étude de la plasticité des monocristaux présente un réel intérêt pour la compréhension de la déformation des métaux pendant leur mise en forme. Parmi les causes possibles de la plasticité des monocristaux CFC, le glissement de dislocations est le mécanisme de déformation prépondérant. L'analyse de leurs mouvements (à l'origine de la déformation), de leur accumulation et de leurs interactions (à l'origine de l'écrouissage) est alors nécessaire si l'on souhaite établir des modélisations macroscopiques du comportement mécanique qui aient un sens physique. Une technique d'analyse pertinente est la simulation par la Dynamique des Dislocations Discrètes (DDD), permettant la simulation de la plasticité directement à l'échelle de la dislocation. Ce code, permet de remplacer les techniques expérimentales comme la Microscopie Electronique en Transmission, en donnant accès à la répartition hétérogène des contraintes qui règnent au sein des microstructures de dislocations et qui conditionnent complètement le comportement mécanique. Dans cette thèse, les analyses réalisées en DDD donnent un réel éclairage sur les variables d'état nécessaires à la caractérisation d'une microstructure de dislocations, et à la description mathématiquement de son état physique. Cela permet d'établir une modélisation riche de la plasticité cristalline, apte à rendre compte d'effets d'écrouissage isotropes et cinématiques complexes. La modélisation proposée est adaptée à simuler une large gamme d'amplitudes de déformations plastiques, allant de la fatigue à grand nombre de cycles ($\varepsilon_p = 10^{-5}$) jusqu'à la traction monotone (ε_p >100 %) sans nécessité de recalage de paramètres.

Mots-clé : Plasticité cristalline, maille CFC, Dynamique de Dislocations, contraintes internes, écrouissage.

INTERNAL STRESS ANALYSIS IN THE FCC SINGLE CRYSTALS : TOWARD A NEW CRYSTAL PLASTICITY LAW

The single crystal plasticity study has a real interest for the strain metals understanding during their forming process. Among the possible causes of FCC single crystal plasticity, the slip of linear defects (dislocations) is the dominant mechanism of deformation. The analysis of their movements (the origin of deformation), their accumulation and their interactions (the origin of strain hardening) is necessary if one wish to build models of macroscopic mechanical behaviour having a physical meaning. A pertinent technical analysis is the simulation of the plasticity directly at the defect scale using the Discrete Dislocation Dynamics code (DDD). This simulation code is an alternative to the experimental techniques such as Transmission Electron Microscopy, giving access to the heterogeneous distribution of the internal stress that prevail in the dislocations microstructure and who determine the mechanical behaviour. This tool offer real opportunities to building macroscopic behaviour models. In this PhD, the analysis conducted in DDD give a real insight onto the state variables needed to characterize the dislocations microstructure, and offer an original way to mathematically describe its physical state evolution. This approach is developed to establish a very rich modelling of crystal plasticity, able to account for complex effects of isotropic and kinematic hardening. The proposed model is able to simulating a wide range of plastic strain amplitudes ranging from fatigue at many number of cycles ($\varepsilon_p = 10^{-5}$) to monotonic traction (ε_p > 100 %) without need for recalibration of parameters.

Keywords : Crystal plasticity, FCC latter, Dynamic Dislocations, internal stress, kinematic hardening.