



### Science Arts & Métiers (SAM)

is an open access repository that collects the work of Arts et Métiers Institute of Technology researchers and makes it freely available over the web where possible.

This is an author-deposited version published in: <https://sam.ensam.eu>  
Handle ID: <http://hdl.handle.net/10985/26445>

#### To cite this version :

Jean-Paul LORRAIN, Tarak BEN ZINEB, Farid ABED-MERAIM, Marcel BERVEILLER -  
Modélisation du comportement élastoplastique de monocristaux de structure cubique.  
Comparaison théorie/expérience - In: 4èmes Journées Scientifiques et Techniques en Mécanique  
et Matériau (JSTMM'02), Tunisie, 2002-10-25 - Actes des 4èmes Journées Scientifiques et  
Techniques en Mécanique et Matériau (JSTMM'02) - 2002

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository

Administrator : [scienceouverte@ensam.eu](mailto:scienceouverte@ensam.eu)



# **MODELISATION DU COMPORTEMENT ELASTOPLASTIQUE DE MONOCRISTAUX DE STRUCTURE CUBIQUE. COMPARAISON THEORIE/EXPERIENCE**

J.P. LORRAIN, T. BEN ZINEB, F. ABED MERAÏM et M. BERVEILLER  
Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux, UMR CNRS 7554  
ENSAM, 4 rue Augustin Fresnel  
Technopôle Metz, F 57078 Metz Cedex 03, France

**RESUME :** Dans cette étude, un modèle de comportement micromécanique monocristallin écrit dans le cadre des grandes déformations tiré de Iwakuma [1983] est présenté. Ce modèle suppose que la déformation plastique est uniquement due au glissement des plans cristallins. La gestion de l'activation des systèmes de glissements est faite à partir d'une loi inspirée de la viscoplasticité tirée de Ben Zineb [2001], ce qui permet un gain de temps considérable par rapport à une approche classique (recherche de la combinaison de systèmes de glissement minimisant l'énergie de Franciosi Zaoui [1991] ). Les résultats expérimentaux pour des essais de cisaillement sont comparés à ceux issus du modèle. Ainsi le modèle présenté est capable de prédire le comportement, avec une bonne adéquation entre théorie et expérience. Cette étude a bénéficié du soutien financier de Arcelor Recherche et Développement.

**Mots clefs :**

Monocristal, micromécanique, plasticité, grandes transformations.

**INTRODUCTION :** De nos jours, les phénomènes liés à la perte de ductilité représentent des coûts considérables pour les industriels. C'est par exemple ce qui coûte le plus cher dans la conception d'une automobile. Il est donc important de réaliser un outil numérique de prédiction de la perte de ductilité. En premier lieu il faut définir le comportement du matériau de façon la plus représentative possible en essayant de définir au mieux la déformation du réseau cristallin lors du chargement (évolution des dislocations, de la texture,...). Pour cela, il est nécessaire d'identifier finement les mécanismes de déformation qui ont lieu au niveau d'un grain et ensuite, grâce à une méthode de transition d'échelle, d'en déduire le comportement de l'agrégat polycristallin. Enfin, il faut introduire un critère de perte de ductilité.

## **DEFINITION DU MODELE DE LOI DE COMPORTEMENT UTILISE**

**Domaine de validité du modèle :** La loi de comportement élastoplastique monocristalline présentée ici est développée dans de nombreux travaux tels ceux d'Asaro [1983], Peirce [1983a], Peirce [1983b]. La modélisation que l'on présente ici est tirée de Iwakuma [1983]. Le comportement du monocristal est supposé élastoplastique et la déformation plastique est uniquement due au glissement des plans cristallins qui sont les plans denses. On ne considère pas les autres modes de déformation tels que le maclage ou les transformations de phase. Dans le cas de la famille des cubiques centrés, il y a 24 systèmes de glissement. Pour établir le modèle de comportement du monocristal on va définir les systèmes de glissement, la cinématique, les systèmes actifs et l'écrouissage. En faisant la combinaison de ce qui précède, on pourra en déduire l'expression de la loi de comportement. De plus, la loi d'écrouissage proposée est valable uniquement pour le stade II de la déformation : on ne prend pas en compte le stade I appelé stade de glissement facile dans lequel un seul système de glissement est activé. Ceci s'explique par le fait que ce mode de déformation n'a lieu que dans le cas du monocristal et est quasi inexistant dans le cas du polycristal. Comme le modèle développé a pour but de modéliser au final le comportement du polycristal cela explique pourquoi on néglige ce domaine.

**Définition d'un système de glissement :** Un système de glissement est défini par une direction de glissement  $m$  (direction dense) et une normale  $n$  au plan de glissement (plan dense). On définit ainsi pour chaque système de glissement  $g$  deux tenseurs de Schmit  $R^g$  et  $S^g$  par :

$$\begin{aligned} R_{ij}^g &= \frac{1}{2} (m_i n_j + m_j n_i)^g \\ S_{ij}^g &= \frac{1}{2} (m_i n_j - m_j n_i)^g \end{aligned} \quad (1)$$

**Décomposition des déformations :** Comme on se place dans le cadre des grandes transformations, on utilise le gradient de la vitesse  $v$  noté  $g$  qui se décompose en une partie symétrique  $d$  et antisymétrique  $w$  :

$$g = d + w \quad (2)$$

Le tenseur  $w$  correspond au taux de rotation totale du réseau cristallin et  $d$  correspond au taux de déformation totale du réseau cristallin. En supposant que les déformations élastiques demeurent assez faibles, il est possible d'assimiler la transformation élastique à la transformation du réseau cristallin. On peut identifier les parties élastique et plastique de la déformation et de la rotation du réseau cristallin en introduisant la vitesse de glissement  $\dot{\gamma}$  de telle sorte que :

$$\begin{aligned} d_{ij} - d_{ij}^e &= R_{ij}^g \dot{\gamma}^g \\ w_{ij} - w_{ij}^e &= S_{ij}^g \dot{\gamma}^g \end{aligned} \quad (3)$$

**Gestion de l'activation des systèmes de glissements** : On peut écrire, pour un système de glissement la valeur de la cission résolue sur ce système ainsi que son évolution :

$$\begin{aligned} \tau_{res}^g &= \sigma_{ij} R_{ij}^g \\ \dot{\tau}_{res}^g &= \hat{\sigma}_{ij} R_{ij}^g \end{aligned} \quad (4)$$

$\tau_{res}^g$  représente la cission résolue au niveau du système de glissement  $g$ ,  $\sigma$  est la contrainte de Cauchy,  $\hat{\sigma}$  est la dérivée corotationnelle de la contrainte de Cauchy. On utilise la dérivée corotationnelle et non la dérivée simple de la contrainte de Cauchy pour avoir une dérivation objective (qui respecte l'indifférence matérielle). On dira qu'un système est actif si la valeur de sa cission résolue atteint une valeur critique notée  $\tau_c^g$  et que son incrément atteint la valeur de l'incrément de la cission critique  $\dot{\tau}_c^g$ . Cela créera une vitesse de glissement non nulle sur le système de glissement considéré. Ce qui peut s'écrire sous la forme :

$$\tau_{res}^g < \tau_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g = 0 \quad (5a)$$

$$\tau_{res}^g = \tau_c^g \text{ et } \dot{\tau}_{res}^g < \dot{\tau}_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g = 0 \quad (5b)$$

$$\tau_{res}^g = \tau_c^g \text{ et } \dot{\tau}_{res}^g = \dot{\tau}_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g > 0 \quad (5c)$$

Il est à noter que la cission critique est différente sur chaque système de glissement, la vitesse de glissement sera toujours positive. On peut écrire la relation (5a), (5b) et (5c) sous la forme (sans sommation sur les indices) :

$$\dot{\gamma}^g = k^g \dot{\tau}_{res}^g \quad (6)$$

Cette formulation est inspirée de la viscoplasticité, cependant on ne prend pas en compte de variable temporelle. Cela permet de réduire considérablement le temps de calcul par rapport à une approche classique qui utilise une analyse combinatoire (de l'ordre de 95%

de temps gagné). Le paramètre d'écrouissage  $k^g$  est défini par la relation suivante dans laquelle on ne somme pas sur les indices :

$$k^g = \frac{1}{H^{gg}} \left\{ \frac{1}{2} (1 + \tanh(k \tau_{res}^g)) \right\} \left\{ \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( k \left( \frac{\tau_{res}^g}{\tau_c^g} - 1 \right) \right) \right) \right\} \left\{ \frac{1}{2} (1 + \tanh(k \hat{\tau}_{res}^g)) \right\} \quad (7)$$

Où  $H^{gg}$  est le terme d'autoécrouissage. La relation (7) montre que le paramètre d'écrouissage est composé de 3 termes, que sa valeur sera  $\frac{1}{H^{gg}}$  si on vérifie les conditions (5c) ainsi que  $\tau_{res}^g > 0$  et 0 dans tous les autres cas.

**Ecrouissage :** Lorsqu'un système de glissement est actif, sa vitesse de glissement peut s'écrire sous la forme (en prenant en compte (4) et (6)):

$$\dot{\gamma}^g = k^g \hat{\sigma}_{ij} R_{ij}^g \quad (8)$$

C'est à dire que la vitesse de glissement est directement liée à l'évolution de la cission critique. Dans le cadre des grandes déformations la loi d'élasticité s'écrit sous la forme :

$$\hat{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} d_{kl}^e - \sigma_{ij} d_{kk}^e \quad (9)$$

Où  $C$  est le tenseur d'élasticité. En faisant quelques manipulations mathématiques et en supposant que la déformation plastique a lieu à volume constant on obtient :

$$\dot{\gamma}^h = \left( \delta_{gh} + k^g R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^h \right)^{-1} k^g R_{ij}^g (C_{ijkl} - \sigma_{ij} \delta_{kl}) d_{kl} \quad (10)$$

Où  $\delta$  est le symbole de Krönecker.

**Loi de comportement incrémentale du monocristal :** La loi constitutive est décrite à partir d'un opérateur tangent reliant le taux de contrainte nominale  $\dot{n}$  au gradient de la vitesse  $g$ . Le taux de contrainte nominale  $\dot{n}$  est obtenu à partir de celui de Cauchy  $\dot{\sigma}$  par :

$$\dot{n}_{ij} = \dot{\sigma}_{ij} - w_{ik}^p \sigma_{kj} - w_{jk}^p \sigma_{ki} + \sigma_{ij} d_{kk} - d_{ik} \sigma_{kj} + w_{jk} \sigma_{ki} \quad (15)$$

En combinant les équations (2), (3), (9), (10) on obtient la loi de comportement incrémentale monocristalline :

$$\dot{n}_{ij} = l_{ijkl} g_{lk} \quad (16)$$

$$l_{ijkl} = \left[ C_{ijkl} - \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{lm} + \delta_{il}\delta_{km})\sigma_{mj} - \frac{1}{2}(\delta_{jk}\delta_{lm} - \delta_{jl}\delta_{km})\sigma_{mi} \right] - \left[ C_{ijpq}R_{pq}^h + S_{ir}^h\sigma_{rj} + S_{js}^h\sigma_{si} \right] \left[ \delta_{gh} + k^g R_{tu}^g C_{tuvw} R_{vw}^h \right]^{-1} k^g R_{xy}^g \left[ C_{xykl} - \sigma_{xy}\delta_{kl} \right] \quad (17)$$

**Actualisation des variables :** Il est nécessaire de présenter la manière dont évoluent les diverses variables du problème. L'actualisation de la cission critique s'écrit sous la forme :

$$\dot{\tau}_c^g = H^{gh}\dot{\gamma}^h \quad (11)$$

La matrice d'écrouissage s'écrit d'après Tabourot [1992] :

$$H^{gh} = \frac{\alpha\mu}{2} \frac{a^{gh}}{\sqrt{a^{gk}\rho^k}} \left( \frac{1}{\bar{L}^h} - 2y_c\rho^h \right) \quad (12)$$

$\alpha$  est un paramètre qui peut être calculé en minimisant l'énergie libre de Gibbs d'une boucle de dislocation d'après Aubert [1998],  $y_c$  est la distance d'annihilation critique, il est possible de relier cette distance à la cission critique initiale d'après Essmann [1979],  $b$  est la norme du vecteur de Burgers,  $\mu$  est le module de cisaillement,  $\rho^h$  est la densité de dislocations du système de glissement  $h$ ,  $a^{gh}$  est la matrice d'interaction qui dépend de 8 constantes ( $a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6, a_7$ ) d'après Hoc [1999], que l'on peut couper en 2 séries de 4 constantes, chaque série correspondant à une famille de systèmes de glissement. Le fait de prendre 8 termes dans la matrice d'interaction au lieu de 2 permet de mieux prendre en compte les phénomènes qui ont lieu dans le matériau lors de changements de trajet de chargement.  $\bar{L}^g$  est le libre parcours moyen au niveau du système de glissement  $g$  qui dépend d'un paramètre  $g_k$  tel que :

$$\bar{L}^g = g_k \left( \sqrt{\sum_{h \neq g} \rho^h} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (13)$$

Le libre parcours moyen est égal, dans ce cas, au rayon moyen d'un grain. Dans le cas du monocristal parler de taille de grain n'a pas de sens ; il faudra identifier ce paramètre à partir d'un essai de référence. Il reste enfin à définir comment évolue la densité de dislocations d'après Tabourot [1992] :

$$\dot{\rho}^g = \frac{1}{b} \left( \frac{1}{\bar{L}^g} - 2y_c\rho^g \right) \dot{\gamma}^g \quad (14)$$

Il y a la présence d'un terme lié au libre parcours moyen qui correspond à la création des dislocations et un terme lié à la distance d'annihilation critique qui correspond à l'adoucissement.

**COMPARAISON ENTRE LA THEORIE ET L'EXPERIENCE :** Pour vérifier la validité du modèle proposé il est intéressant de comparer les résultats expérimentaux de la littérature à ceux donnés par le modèle proposé, et ce, pour divers trajets de chargement.

**Calage des paramètres pour des essais de cisaillement :** Les résultats expérimentaux sont obtenus à partir des travaux de Keh [1967] qui ont, entre autres, réalisé des essais de cisaillement sur des monocristaux de fer à température ambiante. Le tableau 1 récapitule l'orientation cristallographique des monocristaux considérés définie par deux des trois angles d'Euler :

Tableau 1 Orientation des monocristaux de ferrite

| Essai | Deuxième angle d'Euler | Troisième angle d'Euler |
|-------|------------------------|-------------------------|
| A     | 90°                    | 0°                      |
| B     | 90°                    | 45°                     |
| C     | 54°                    | 45°                     |
| D     | 86°                    | 45°                     |
| E     | 82°                    | 45°                     |
| G     | 72°                    | 45°                     |
| H     | 65°                    | 45°                     |

Une procédure d'identification manuelle a permis de calculer les paramètres du modèle ainsi que la valeur du troisième angle d'Euler.

Tableau 2 Paramètres du modèle

| Paramètres   | Valeur          |
|--|-----------------|
| Module d'Young (MPa)                               | 210000          |
| Coefficient de Poisson                             | 0.3             |
| Distance d'annihilation critique (nm)              | 2.7             |
| Paramètre du libre parcours moyen                  | 220             |
| Cission critique initiale (MPa)                    | 9               |
| Densité de dislocation initiale (m <sup>-2</sup> ) | 10 <sup>9</sup> |
| Premier angle d'Euler (°)                          | 0               |
| Module du vecteur de Burgers $b$ (nm)              | 25              |
| Paramètre $\alpha$                                 | 0.48            |

**Résultats obtenus pour des essais de cisaillement :** Les figures 1 à 7 présentent les résultats obtenus avec les paramètres présentés ci-avant. Il est à noter que la figure 1 représente la courbe sur laquelle ont été identifiés les paramètres du modèle et que les autres résultats sont présentés en gardant tous les paramètres physiques constants à l'exception des angles d'Euler.

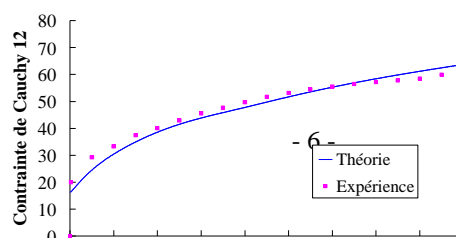


Figure 1: Identification paramétrique pour l'orientation 0-90-45

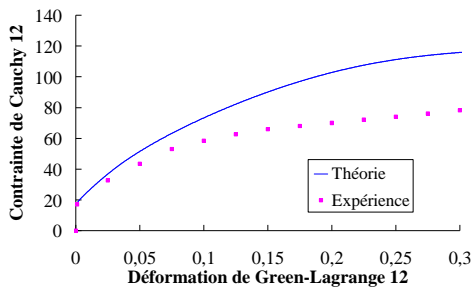


Figure 2: Résultat orientation 0-90-0

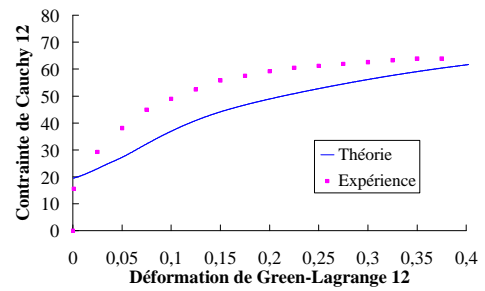


Figure 3: Résultat orientation 0-54-45

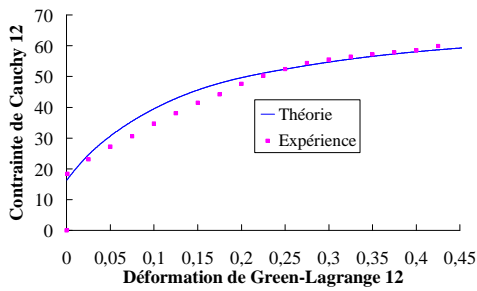


Figure 4: Résultat orientation 0-86-45

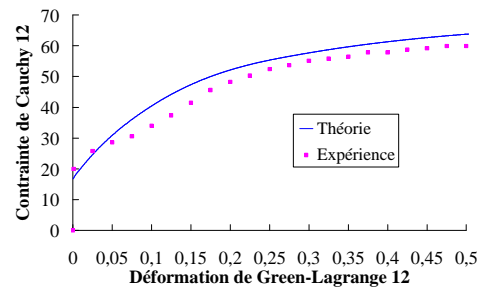


Figure 5: Résultat orientation 0-82-45

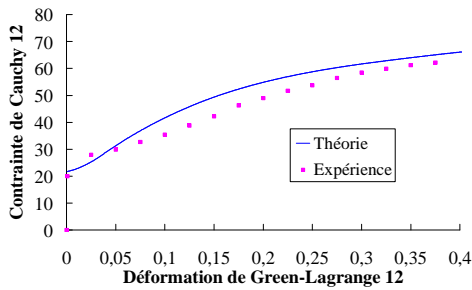


Figure 6: Résultat orientation 0-72-45

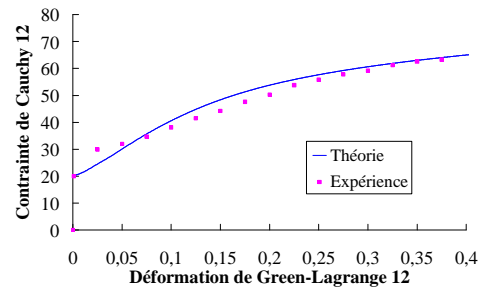


Figure 7: Résultat orientation 0-65-45

Les sept figures présentées montrent que l'accord entre la théorie et la réalité est bon dans chacun des cas présentés, et ce, d'autant plus que les orientations monocristallines sont

éloignées les unes des autres. Il est à noter que les résultats expérimentaux où apparaissait le stade I de déformation ont été légèrement modifiés (le stade I a été "gommé" et la déformation est supposée commencer directement au stade II), cela correspond aux figures 5,6 et 7.

**CONCLUSION ET PERSPECTIVES :** Le travail présenté propose un modèle micromécanique de comportement monocristallin écrit dans le cadre des grandes déformations. La gestion de l'activation des systèmes de glissement présentée permet des gains de temps de calcul considérables. Le temps de calcul, au contraire du modèle classique, ne dépend pas de l'orientation du monocristal. De plus, ce modèle permet de prédire le comportement de monocristaux de ferrite pour diverses orientations monocristallines avec un seul jeu de paramètres physiques identifiés sur un essai de référence. Pour valider complètement ce modèle, il faudrait faire d'autres types de chargements et comparer la théorie avec l'expérience en prenant par exemple les essais de laminage de Orlans-Joliet [1989] ou de traction de Pollnow [1973].

**REMERCIEMENTS:** Les auteurs tiennent à remercier Xavier Lemoine pour son soutien scientifique ainsi que Arcelor Recherche et Développement pour son soutien financier.

## REFERENCES

- Asaro, R.J., (1983), "Crystal plasticity", *Journal of applied mechanics*, vol. 50, pp. 921..934.
- Aubert, I., (1998), "Effet de l'hétérogénéisation plastique sur le comportement macroscopique lors de chargement complexes", *Thèse de l'université de Metz*.
- Ben Zineb, T., Arbab Chirani, S. et Berveiller, M., (2001), "Nouvelle formulation de la plasticité cristalline utilisant une contrainte de référence avec écrouissage", *15<sup>ème</sup> Congrès français de mécanique*, Nancy.
- Essmann, U. et Mughrabi, H., (1979) "Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities", *Philosophical magazine A*, vol. 40, N°6, pp. 731..756.
- Franciosi, P. et Zaoui, A., (1991), "Crystal hardening and the issue of uniqueness", *International Journal of plasticity*, vol. 7, pp. 295..311.
- Hoc, T., (1999), "Etude expérimentale et numérique de la localisation lors de changements de trajets dans un acier doux", *Thèse de l'école centrale Paris*.
- Iwakuma, T. et Nemat-Nasser, S., (1983), "Finite Elastic-Plastic deformation of polycrystalline metals and composites", *Earthquake research and engineering laboratory*, rapport technique n° 83-3-51.
- Keh, A.S. et Nakada, Y., (1967) "Plasticity of iron single crystal", *Canadian Journal of Physics*, vol. 45, pp. 1101..1120.
- Orlans-Joliet, B., (1989) "Déformation plastique de monocristaux de structure cubique centrée en compression plane" *Thèse de L'Ecole nationale supérieure des mines de Paris et Ecole nationale des mines de Saint-Etienne*.
- Peirce, D., (1983a), "Shear band bifurcation in ductile single crystals", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 31, N°2, pp. 133..153.
- Peirce, D. Asaro, R.J. et Needleman, A., (1983b), "Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids", *Acta metallurgica* vol. 31, N°12, pp. 1951..1976.
- Tabourot, L., (1992), "Loi de comportement élastoviscoplatique du monocristal en grandes transformations" *Thèse de l'université de Grenoble*.
- Pollnow, D., Penelle, R. et Lacombe, P., (1973), "Etude des propriétés mécaniques et du taux de consolidation des monocristaux de fer déformés par traction à température ambiante" *Mémoires Scientifiques Revue Métallurgique*, vol. LXX, n°10, pp. 703..714.