



HAL
open science

Plasticité des matériaux amorphes : Étude et développement d'un modèle statistique

Mehdi Talamali

► **To cite this version:**

Mehdi Talamali. Plasticité des matériaux amorphes : Étude et développement d'un modèle statistique. Matériaux et structures en mécanique [physics.class-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2009. Français. NNT : . pastel-00559046

HAL Id: pastel-00559046

<https://pastel.hal.science/pastel-00559046>

Submitted on 24 Jan 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse de Doctorat

Université Pierre et Marie Curie, Paris 6

Spécialité : Physique

présenté par
Mehdi TALAMALI

École Doctorale ED 389 :
La physique de la particule à la matière condensée

Plasticité des matériaux amorphes : étude et développement d'un modèle statistique

Soutenue le 27 novembre 2009
devant un jury composé de :

Elisabeth Bouchaud	SPCSI, CEA-Saclay	Invitée
Eric Clément	PMMH, CNRS/ESPCI	
François Lequeux	PPMD, CNRS/ESPCI	
Farhang Radjai	LMGC, CNRS/Univ. Montpellier 2	Rapporteur
Stéphane Roux	LMT, CNRS/ENS Cachan	Invité
Ken Sekimoto	MSC, CNRS/Univ. Paris 7	Rapporteur
Anne Tanguy	LPMCN, CNRS/Univ. Lyon 1	
Damien Vandembroucq	PMMH, CNRS/ESPCI	Directeur

Laboratoire Surface du Verre et Interfaces, Unité Mixte CNRS/Saint-Gobain
Laboratoire Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes CNRS/ESPCI

Table des matières

Introduction générale - Plasticité des verres, intérêts industriels et défis scientifiques	3
1 Modèle statistique de la plasticité des matériaux désordonnés	11
1.1 Réorganisations locales comme mécanisme élémentaire	11
1.2 Modèle statistique des réorganisations locales	12
1.2.1 Déformation en géométrie plane	13
1.2.2 Définition d'un critère local de plasticité	14
1.2.3 Dynamique extrémale	15
1.3 Interaction élastique quadripolaire induite par une inclusion plastique . . .	15
1.3.1 Inclusion d' <i>Eshelby</i>	15
1.3.2 Potentiels de <i>Kolossov-Muskhelichvili</i>	16
1.4 Algorithme	19
1.5 Conclusion	19
2 Mise en œuvre numérique de la réponse élastique à un événement plastique	21
2.1 Discrétisation dans l'espace direct	21
2.1.1 Application d'une déformation plastique en cisaillement pur	22
2.1.2 Conditions limites bi-périodiques	23
2.1.3 Fonction de <i>Green</i> normalisée et respectant la condition d'équilibre	23
2.1.4 Fonction de <i>Green</i> "réduite"	24
2.1.5 Fonction de <i>Green</i> opérationnelle obtenue par discrétisation dans l'espace direct	25
2.2 Caractérisation de la dynamique du modèle par analyse des valeurs propres	26
2.2.1 Illustration avec une réponse de type champ moyen	27
2.2.2 Cas avec des valeurs propres positives	29
2.2.3 Cas avec une discontinuité du spectre des valeurs propres	30
2.3 Discrétisation dans l'espace de <i>Fourier</i>	31
2.4 Conclusion	32
3 Comportement macroscopique	35
3.1 Rappels de mécanique des milieux continus	35
3.2 Courbes de chargement	36
3.2.1 Passage en déformation	37

3.2.2	Seuil d'écoulement	39
3.3	Interprétation statistique de l'écrouissage	41
3.4	Conclusion	42
4	Localisation et diffusion des déformations plastiques locales	45
4.1	Un simple régime diffusif?	45
4.2	Interactions des événements plastiques corrélées le long du régime stationnaire	47
4.3	Anisotropie des déformations plastiques locales	49
4.4	Corrélation spatio-temporelle des déformations plastiques	54
4.5	Temps de retour	58
4.6	Conclusion	58
5	Analyse des avalanches d'événements plastiques	61
5.1	Définition d'une avalanche pour décrire le phénomène de cascade	61
5.2	Distribution des tailles d'avalanche	62
5.3	Taille de coupure des avalanches	63
5.4	Caractérisation des structures formées lors d'une avalanche	67
5.5	Conclusion	69
6	Comportement du modèle près du seuil critique	71
6.1	Distributions des forces de <i>depinning</i>	71
6.2	Détermination du seuil critique	72
6.3	Comportement universel près du seuil critique	74
6.4	Caractérisation de la population sous-critique	76
6.5	Conclusion	78
	Conclusion et perspectives	79
A	Identification d'événements plastiques localisés par intégrale de contour	81
	Article - <i>Path-independent integrals to identify localized plastic events in two dimensions</i>	83
B	Anisotropie structurelle induite par déformation dans un échantillon de verre de silice amorphe	89
	Article - <i>Plasticity-induced structural anisotropy of silica glass</i>	91
	Bibliographie	94

Introduction générale - Plasticité des verres, intérêts industriels et défis scientifiques

Avant même la maîtrise de sa fabrication, le verre, sous sa forme naturelle (par exemple, l'obsidienne, verre volcanique), était déjà utilisé 100000 ans avant *J.C.* pour fabriquer des pointes de flèche et des bijoux. Avec le développement des procédés de fabrication, les possibilités de son utilisation ne cessent de s'ouvrir sur un large éventail. Par ses nombreuses qualités (transparence, rigidité, inertie chimique, etc.), il est devenu un matériau incontournable pour différentes industries telles que la construction, l'automobile ou l'agroalimentaire, et bien sûr pour les domaines artistiques.

Le verre est obtenu par un refroidissement rapide, afin d'empêcher la cristallisation, d'un liquide composé d'oxydes formateurs (le squelette du verre, le plus souvent d'oxyde de silicium : SiO_2) et de fondants (servant à abaisser la température de fusion de la silice : Na_2O , K_2O , ...), pour atteindre un état vitreux. Lors d'un refroidissement, nous obtenons sous la température de fusion T_f une phase liquide surfondue qui se solidifiera au voisinage d'une température T_g , dite de transition vitreuse. Le matériau résultant est un solide structurellement désordonné. Ainsi, le verre est défini comme un composé amorphe, c'est-à-dire non cristallin. L'ordre à courte distance, au niveau moléculaire, est conservé. Par contre, il n'existe aucun ordre structurel à grande distance. Outre son caractère amorphe, le verre est un matériau isotrope sur une échelle de quelques nanomètres : les propriétés physiques sont identiques quelle que soit la direction d'observation.

Le comportement mécanique du verre est dominé par sa nature fragile qui fait de lui un matériau cassant sous l'effet de contraintes mécaniques fortes. Néanmoins, des déformations irréversibles peuvent être observées à des échelles micrométriques. Par des tests mécaniques, ce comportement plastique peut être mis en évidence à des échelles typiques entre le nanomètre et le micromètre.

Issue des travaux de *E.W. Taylor* [1], la figure 1 représente l'une des premières expériences, datant de 1949, et mettant en évidence un écoulement plastique dans du verre. Nous pouvons observer des empreintes plastiques sans fissure ni rupture lors d'un test d'indentation avec différentes charges mécaniques. Des rayures nettes, produites par une pointe dure lors de tests de mesure de dureté, avaient déjà été observées sur du verre dans les années 1920 par *G. Gehloff* et *M. Thomas* (Fig. 2). Par la suite, au début des années 50, *E. Bruche* et *G. Schimmel* [3] ont démontré que, à l'intersection de deux rayures sur verre, le premier sillon est comblé par de la matière provenant du deuxième, un phénomène

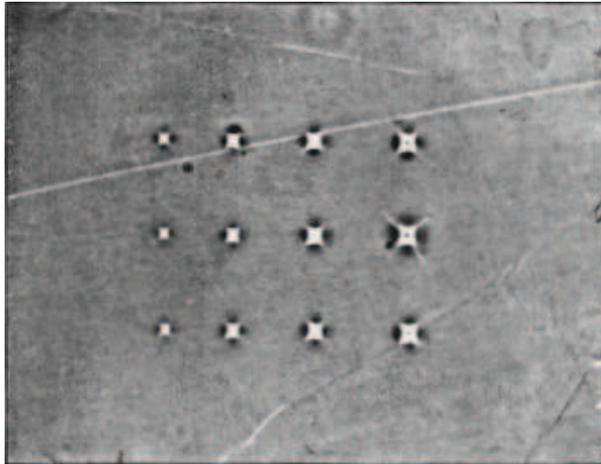


FIGURE 1: Empreintes plastiques sur du verre par indentation et pour différents niveaux de chargement mécanique, *E. W. Taylor* [1].

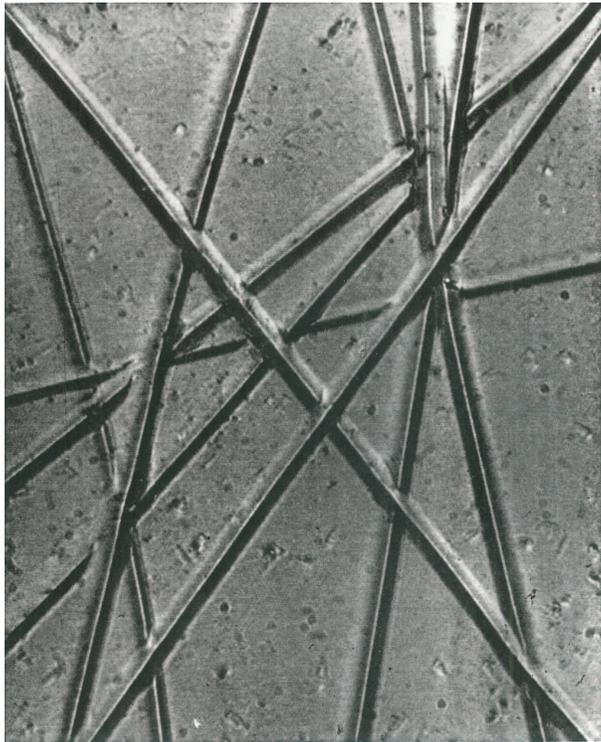


FIGURE 2: Rayures plastiques produites par une pointe dure sur du verre. (Reproduction issue d'un article de *D.M. Marsh* [2])

possible seulement dans le cas des matériaux plastiques. Ces travaux ont été analysés plus tard par *D.M. Marsh* [2].

La densification induite lors de tests de compression à haute pression a pu fournir une preuve additionnelle de l'existence de déformation permanente à température ambiante [4, 5, 6]. Afin de mesurer cette variation de densité suite à un test d'indentation, *F.M. Ernsberger* a développé une méthode basée sur l'effet de lentille optique dû au gradient de densité d'une zone sous indent [7]. Les travaux de *K.W. Peter* [8], quant à eux, ont démontré que différents comportements en indentation peuvent être observés pour différents types de verre. Pour les verres dits "normaux", du verre à vitre par exemple, la majorité des déformations sont en cisaillement et presque sans densification (Fig. 3(a)). En revanche, pour les verres dits "anormaux", de la silice amorphe par exemple, la densification permanente peut atteindre 20% (Fig. 3(b)). De manière générale, le comportement plastique des verres est caractérisé par un fort couplage entre déformations volumique et déviatorique.

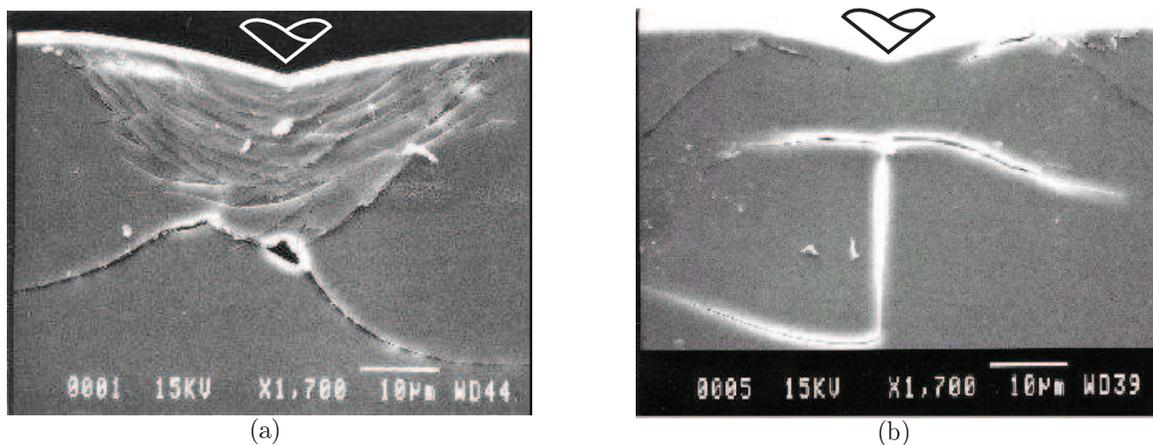


FIGURE 3: Coupes de zones indentées pour des verres de type (a) normal, par exemple, verre à vitre ; (b) anormal, par exemple, la silice amorphe.

Le comportement plastique contrôle les propriétés des contacts mécaniques (la résistance aux rayures, par exemple) et les mécanismes de fissure. N'ayant aucun "défaut" de type dislocation nous permettant d'identifier ce phénomène de plasticité pour le verre ou pour tout autre matériau amorphe, il est nécessaire de rechercher des mécanismes microscopiques alternatifs pour la plasticité des amorphes.

Les premières études théoriques sur la plasticité des matériaux amorphes, en général, et des verres, en particulier, datent de la fin des années 1970. Les travaux de *A.S. Argon* [9] et de *F. Spaepen* [10] marquent le début de ces études. Travaillant sur des verres métalliques, ils ont été à l'origine des premières propositions de mécanisme microscopique pour la plasticité des amorphes. La proposition de *A.S. Argon* était fondée sur un mécanisme de réorganisation collective sous cisaillement d'un ensemble d'atomes de nombre variable (Fig. 4(a)). La proposition de *F. Spaepen*, quant à elle, était basée sur l'idée d'un mouvement atomique individuel similaire au processus de diffusion de cavités (Fig. 4(b)). [11][12]

En raison de la fragilité du verre, le choix des tests expérimentaux est assez limité : test

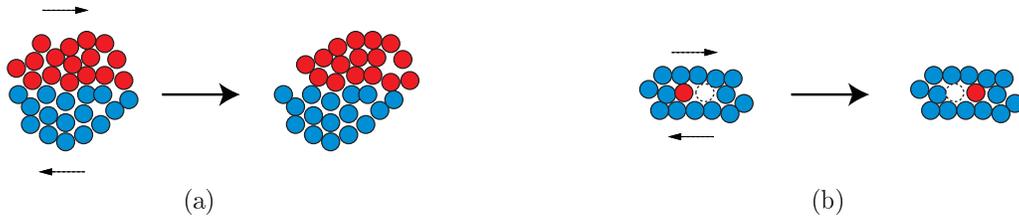


FIGURE 4: Mécanismes microscopiques proposés pour la plasticité des matériaux amorphes par : (a) *A.S. Argon* - réorganisation collective d'un ensemble d'atomes ; (b) *F. Spaepen* - mouvement atomique individuel. (Reproduction issue d'une revue de *C.A. Schuh* [12])

d'indentation et cellule à enclume de diamant (qui permet d'obtenir des conditions d'essai hydrostatiques jusqu'à quelques dizaines de GPa), par exemple. De plus, il est très difficile de mesurer la densité vue l'échelle microscopique à laquelle le phénomène de plasticité se produit. L'essor des méthodes numériques (en particulier les méthodes de modélisation en dynamique moléculaire) a permis d'aller au-delà des limitations expérimentales et de proposer des modèles théoriques afin d'accroître notre compréhension de la rhéologie et de la plasticité des amorphes.

Initiée par des travaux plus récents de *A.S. Argon* et *V.V. Bulatov* [13, 14, 15], l'étude de la plasticité des matériaux amorphes a été relancée à la fin des années 1990 par la publication des travaux de *M.L. Falk* et *J.S. Langer* [16]. Du point de vue technique, leurs travaux, centrés sur les verres métalliques, étaient basés sur des simulations en dynamique moléculaire en deux dimensions avec un potentiel interatomique de *Lennard-Jones* pour un verre binaire. Les résultats de *M.L. Falk* et *J.S. Langer* ont pu mettre en évidence l'existence de régions constituées d'un certain nombre d'atomes susceptibles de se réarranger sous l'effet d'une déformation en cisaillement, des régions désignées par "*shear transformation zones*" (*STZ*). De plus, ils ont décrit par une loi d'évolution la densité de ces régions. Ainsi, la plasticité des amorphes a pu être décrite comme une succession de réorganisations locales (Fig. 5).

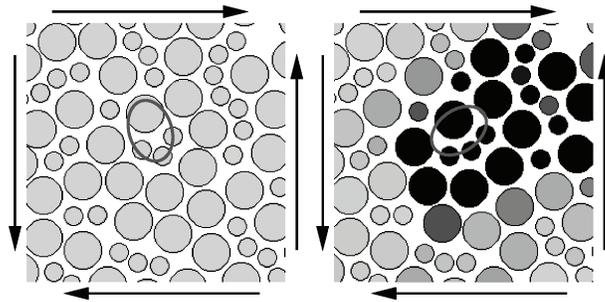


FIGURE 5: Réarrangement d'une région sous l'effet d'une déformation en cisaillement, "*shear transformation zones*" (*STZ*), dont la succession permet de décrire la plasticité des matériaux amorphes. (Reproduction issue d'un article de *M.L. Falk* et *J.S. Langer* [16])

Revenons plus en détail sur la multitude des travaux basés sur les "expérimentations numériques". Le développement exponentiel des capacités de calcul a permis ces dernières

années d'avoir recours aux simulations numériques pour étudier la déformation des verres. Outre qu'elles permettent de simuler des essais dans des géométries simples pourtant inaccessibles expérimentalement (traction uniforme, cisaillement simple, etc.) en raison de la fragilité des matériaux, les techniques numériques, comme la dynamique moléculaire, permettent d'accéder à l'échelle atomique. Pour peu que les échantillons simulés soient de taille suffisante, il est donc envisageable d'étudier le comportement mécanique à une échelle "macroscopique" ainsi que de chercher à caractériser les mécanismes microscopiques à l'origine des déformations plastiques. En nous en tenant aux simulations les plus simples (potentiels interatomiques empiriques à deux ou trois corps), la principale limite de cette technique est moins dans la taille des échantillons simulés (qui aujourd'hui peut dépasser la dizaine de millions d'atomes) que dans la faiblesse des durées qu'il est possible de simuler (un pas de temps typique pour la simulation d'une silice amorphe en trois dimensions est la femtoseconde). Ceci implique des vitesses de trempe beaucoup plus grandes que les vitesses expérimentales les plus élevées (obtenues par fibrage), lors de la préparation du verre. Ce qui n'est *a priori* pas sans conséquence sur sa structure. En outre, du point de vue des simulations mécaniques, le même problème se pose avec les taux de déformation qui sont extraordinairement élevés vis à vis des standards expérimentaux. Ajoutons à ces limites purement numériques le fait que les potentiels empiriques, le plus souvent ajustés sur des données structurales dans les conditions ambiantes de température et de pression, sont ici utilisés dans des conditions de contraintes extrêmes, bien loin des conditions utilisées pour leur "validation". La prudence prévaut donc avant toute généralisation aux matériaux réels des comportements observés numériquement. Ces limites à l'esprit, les techniques de dynamique moléculaire sont un outil particulièrement précieux qui permet d'étudier des matériaux "modèles" et s'il est prématuré d'espérer un véritable accord quantitatif avec l'expérience, il reste possible de chercher à observer et analyser des comportements génériques sur les mécanismes de réorganisations structurales, de localisation, etc.

Dans ce contexte, il n'est pas étonnant que la plupart des systèmes simulés dans le cadre d'études de déformations plastiques soient des verres modèles du type *Lennard-Jones* 2D [16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31] ou quelquefois 3D [32, 33]. On retrouve cependant des simulations utilisant des potentiels cherchant à simuler des verres métalliques [34], du silicium amorphe [35, 36, 37, 38], des polymères vitreux [39, 40] ou des verres de silice [41, 42]. Notons dans le cas de la silice amorphe qu'en sus des études d'écoulement sous cisaillement, un très grand nombre d'études a été consacré au phénomène de densification permanente sous l'effet de la pression [43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51].

L'ensemble des résultats numériques obtenus dans ces études de dynamique moléculaire permet de mettre en évidence toute la richesse du comportement mécanique des amorphes.

Un certain nombre d'études a été consacré à une caractérisation du comportement plastique à l'échelle continue. Des travaux de *A.C. Lund* et *C.A. Schuh* [34] sur des verres métalliques comme de ceux de *J. Rottler* et *M.O. Robbins* [39, 40] sur des polymères vitreux, il ressort que le critère de plasticité présente une dépendance en pression. Du point de vue de leur comportement plastique, les verres semblent donc présenter un comportement très différent de celui des métaux pour lesquels la pression ne joue aucun rôle.

À l'échelle microscopique, le comportement élastique des amorphes a été très discuté [17, 19, 20, 21, 23, 24, 41, 52, 28, 29]. Il apparaît que, en raison du désordre de la structure, les verres doivent être considérés comme des matériaux inélastiquement inhomogènes. Lors de l'application d'une contrainte uniforme, le désordre des "raideurs" locales induit ainsi, en sus de la déformation uniforme, une déformation élastique "non-affine". Celle-ci s'explique par le fait que si, avant sollicitation, le verre se trouve dans un minimum d'énergie local, ce n'est plus le cas lorsque on impose une déformation uniforme ; les déformations "non-affines" permettent alors le retour à l'équilibre mécanique de la structure. Des opérations de type *coarse-graining* [53] permettent de retrouver un comportement homogène au delà de quelques longueurs inter-atomiques [52, 29].

La question des mécanismes microscopiques à l'origine des déformations plastiques a évidemment suscité un très grand intérêt [16, 17, 35, 19, 20, 36, 37, 24, 28, 29, 38, 54, 55]. Pour l'essentiel, le scénario de réorganisations locales sous contraintes ("*shear transformation zones*") proposé par *A.S. Argon* [9] puis *M.L. Falk* et *J.S. Langer* [16] semble être confirmé numériquement. Il est notamment possible d'identifier dans les champs de contrainte, estimés numériquement, une composante quadripolaire typique de l'effet d'une inclusion plastique dans une matrice élastique [19, 25]. Pour le reste, malgré les efforts entrepris jusqu'alors, la caractérisation des événements plastiques locaux tout comme leur lien avec la structure du verre sous-jacente demeure une entreprise difficile. Dans ce cadre *A. Tanguy* et *coll.* ont récemment cherché à corrélérer la survenue d'un réarrangement avec les zones de faible module élastique [29].

Au delà des études sur les mécanismes microscopiques de la plasticité, il existe également des travaux sur la phénoménologie de la déformation plastique. Du fait de son importance pour la tenue mécanique, la localisation de la déformation plastique a reçu une attention particulière [18, 22, 33, 30]. Comme dans d'autres systèmes désordonnés sous sollicitation mécanique (fracture par exemple), la déformation plastique des amorphes n'est pas un phénomène "continu" mais semble procéder par avalanches successives. Ces phénomènes d'avalanche ont notamment été discutés par *C.E. Maloney* et *A. Lemaître* [19] et plus récemment par *A. Lemaître* et *C. Caroli* [31].

Les résultats des travaux sur les mécanismes microscopiques de la plasticité dans les matériaux amorphes ont motivé le développement des modèles statistiques à l'échelle mésoscopique basés sur la compétition entre désordre et interactions élastiques à longue portée [56, 57, 58, 59, 60, 61]. De la même manière, des modèles statistiques ont également été développés pour décrire la plasticité des matériaux polycristallins [62]. En s'intéressant à la vorticit  du champ de contrainte qui peut  tre vue comme une densit  de dislocation, *O. Takeshi* et *K. Sekimoto* [63] ont pu suivre l' volution des contraintes internes dans un mod le de fluide  lastoplastique. Plus r cemment, *E.R. Homer* et *C.A. Schuh* [64] ont propos  une extension au mod le discret de la plasticit  des amorphes d velopp  par *A.S. Argon* et *V.V. Bulatov* [13, 14, 15] durant le d but des ann es 1990.

Parall lement, de nombreux travaux sur la m canique des milieux d sordonn s, tel que la fracture et l'endommagement des mat riaux h t rog nes [65], la friction aux  chelles nanom triques [66, 67], le frottement de failles g ologiques [68, 69, 70], le comportement des milieux granulaires [71] et des fluides complexes [72], se sont bas s sur des m thodes de physique statistique et ainsi offraient de nouvelles perspectives. Tout ceci a permis d'accro tre notre compr hension de la plasticit  des mat riaux amorphes.

Suivant l'esprit des travaux de *M.L. Falk* et *J.S. Langer* [16], nous pouvons faire l'hypothèse que la déformation plastique macroscopique des matériaux amorphes est une succession de réarrangements locaux. Cependant, afin de compléter cette description de type "champ moyen", il est essentiel de s'intéresser aux interactions élastiques entre ces réarrangements. Chaque réarrangement, autrement dit chaque déformation plastique microscopique, induit en effet dans le reste du matériau des contraintes élastiques qui sont à l'origine de fortes corrélations spatiales des déformations. Bien entendu, ces contraintes élastiques dépendent *a priori* des matériaux et des déformations macroscopiques appliquées. Nous verrons cependant qu'à grande distance ces interactions revêtent une forme universelle de symétrie, respectivement, dipolaire ou quadripolaire selon que l'événement considéré soit de type dilatation ou cisaillement. Suite aux études de *A. Tanguy et coll.* [25], nous pouvons voir sur la figure 6(a) le champ de contrainte quadripolaire induit dans un verre binaire *Lennard-Jones* en 2D sous cisaillement par une réorganisation locale. La figure 6(b) représente, quant à elle, la solution analytique pour le champ de contrainte élastique induit par une déformation plastique locale, implémentée dans le modèle développé pour ce travail et présentée plus en détail ultérieurement.

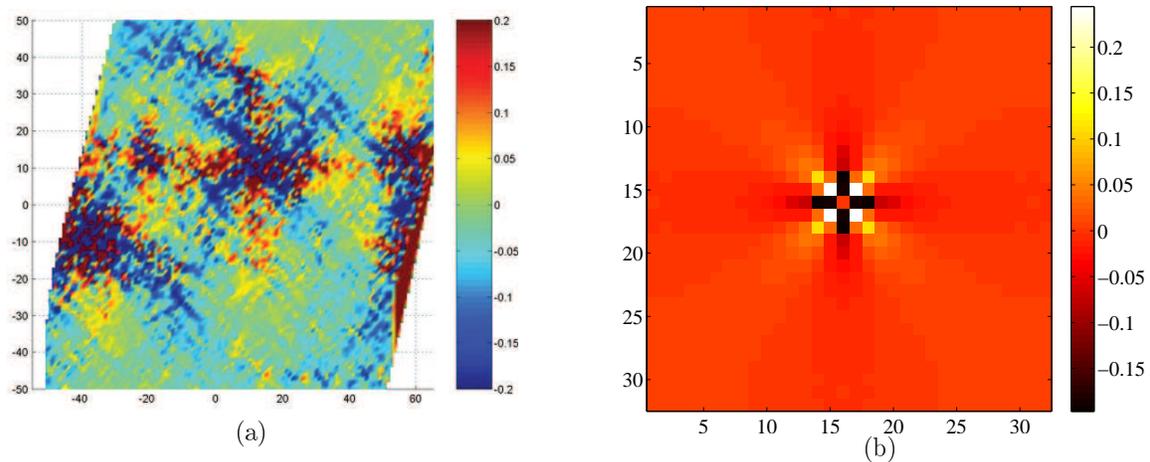


FIGURE 6: (a) Champ de contrainte quadripolaire induit par un réarrangement et obtenu par simulation en dynamique moléculaire d'un verre binaire *Lennard-Jones* en 2D sous cisaillement. (Reproduction issue d'un article de *A. Tanguy et coll.* [25]) (b) Représentation de la solution analytique de la réponse élastique à une déformation plastique implémentée dans notre modèle.

Dans le même esprit que le modèle de *J.-C. Baret et coll.* [56] ou celui de *G. Picard et coll.* [57], et pour comprendre l'effet des interactions élastiques sur le comportement collectif des réarrangements plastiques, nous avons choisi, dans le cadre de ce travail de thèse, de traiter le problème à une échelle intermédiaire. Le choix de cette échelle mésoscopique, située entre celle des réarrangements microscopiques et celle du comportement macroscopique, nous permettra ainsi de faire la distinction entre les caractères universels et les détails microscopiques dans le comportement plastique des matériaux amorphes.

L'utilisation des modèles de *pinning* ("épinglage" ou "accrochage"), dans le cas des

interfaces élastiques, permet de décrire la phénoménologie d'une grande variété de problèmes physiques tels que le mouillage sur substrat [73, 74] ou la propagation de front de fracture dans un matériau hétérogène [75, 76, 77]. S'inspirant de ces modèles, l'idée ici est de construire un modèle de type *pinning* pour la plasticité des amorphes.

Pour commencer, nous allons définir le modèle bidimensionnel dans le chapitre 1. En utilisant le principe d'inclusion d'*Eshelby* [78] et une méthode s'appuyant sur les potentiels de *Kolossov-Muskhelichvili* [79], nous nous appliquerons à définir sur un plan continu la réponse élastique à un réarrangement plastique. Le chapitre 2 consistera à exposer la mise en œuvre numérique nous permettant d'exploiter cette réponse élastique sur un plan discret. En parallèle, le formalisme de *Kolossov-Muskhelichvili* nous a servi aussi à élaborer un protocole basé sur une intégrale de contour et permettant de caractériser une réorganisation plastique à partir du champ de déplacement lointain. Ceci a fait l'objet d'une publication [80] que nous avons mise en annexe A.

Avant de nous intéresser aux interactions élastiques entre les réarrangements, nous examinerons dans le chapitre 3 le comportement macroscopique résultant de ce modèle mésoscopique. Au-delà de l'analyse de l'évolution des paramètres macroscopiques, nous donnerons une interprétation statistique du phénomène d'écrouissage observé dans ce modèle, un phénomène caractérisé par une limite plastique dépendante de l'historique du chargement appliqué.

Par la suite, nous consacrerons le chapitre 4 aux corrélations spatio-temporelles des réarrangements plastiques afin d'étudier l'anisotropie et la localisation des réorganisations successives. Outre la dynamique individuelle des réarrangements plastiques et leurs interactions, nous examinerons dans le chapitre 5 leur dynamique collective en caractérisant les avalanches d'événements et en analysant leur distribution.

En plus de l'étude des corrélations spatio-temporelles des réarrangements plastiques et des cascades ou avalanches d'événements successifs, le modèle utilisé, faisant partie de la famille des modèles de *pinning*, nous permet d'analyser dans le chapitre 6 les distributions des forces critiques et l'effet de taille finie du système.

Via des collaborations et au travers du projet ANR PlastiGlass (2006-2008), nous nous sommes intéressés à la plasticité des matériaux amorphes, en général, et du verre, en particulier, en essayant d'avoir une vision globale du phénomène [56, 81, 82, 83, 42]. Entre l'échelle macroscopique avec les tests mécaniques et la modélisation en éléments finis et l'échelle microscopique avec la modélisation en dynamique moléculaire, ce travail de thèse, basé sur un modèle mésoscopique, s'imbrique parfaitement dans cette vision globale sur la plasticité.

Dans cette perspective, une partie du temps alloué à cette thèse a été consacrée au développement d'une procédure afin d'appliquer des déformations à un échantillon tri-dimensionnel en dynamique moléculaire tout en respectant ses conditions limites. Nous présenterons en annexe B les résultats obtenus par modélisation en dynamique moléculaire. Publiés dans un récent article [42], ces résultats mettent en évidence l'anisotropie structurelle induite par les déformations plastiques subies par un échantillon de SiO_2 .

Chapitre 1

Modèle statistique de la plasticité des matériaux désordonnés

Dans le présent chapitre, nous exposerons le modèle mésoscopique en géométrie plane de plasticité des amorphes développé durant ce travail de thèse. Ce modèle très simple (scalaire, 2D), reposant sur une compétition entre désordre et interactions élastiques et mis en œuvre *via* une dynamique extrémale, doit nous permettre de caractériser le comportement plastique des matériaux amorphes, d'étudier la corrélation spatio-temporelle de la déformation plastique et faire le lien avec la transition critique comme dans le cas des modèles de type *pinning*.

1.1 Réorganisations locales comme mécanisme élémentaire

Dans le cas des matériaux désordonnés, les phénomènes, ayant lieu lors d'une déformation plastique, sont encore mal compris. Qu'en est-il des matériaux cristallins ?

On désigne par cristal ou matériau cristallin un solide à structure régulière et périodique avec un ordonnancement d'un même motif, appelé maille et composé d'atomes, de molécules ou d'ions. Lorsque, par exemple, on impose une déformation en cisaillement à un réseau cristallin, on observe un déplacement des dislocations, correspondant à l'adaptation du réseau à une déformation irréversible (Fig. 1.1). Il s'agit du mécanisme fondamental de la plasticité des milieux cristallins.

Dans le cas des composés amorphes, les atomes ne respectent aucun ordre à moyenne et grande distance. Pour les matériaux amorphes tels que les verres, les pâtes et les mousses, le mécanisme de dislocation, comme montré pour un réseau cristallin, ne peut être utilisé pour expliquer et décrire le comportement plastique de cette classe de composés. Toutefois, par des études récentes [13, 14, 15, 16], nous pouvons décrire ces déformations par un réarrangement local d'atomes permettant d'accommoder les contraintes externes appliquées (Fig. 1.2). La réorganisation de ces zones individuelles et localisées, appelées communément "*shear transformation zones*" (*STZ*), constitue le mécanisme élémentaire des mouvements atomiques pendant les déformations plastiques. Le nombre d'atomes composant ces zones varie avec la nature du matériau étudié. De plus, ces zones interagissent

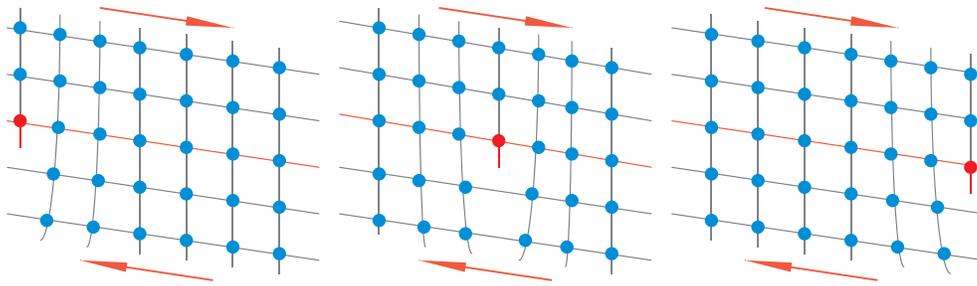


FIGURE 1.1: Réseau cristallin avec une dislocation (en rouge) - sous l'effet d'une contrainte de cisaillement, le déplacement de la dislocation accommode une déformation irréversible.

via des interactions élastiques à travers le reste du milieu.

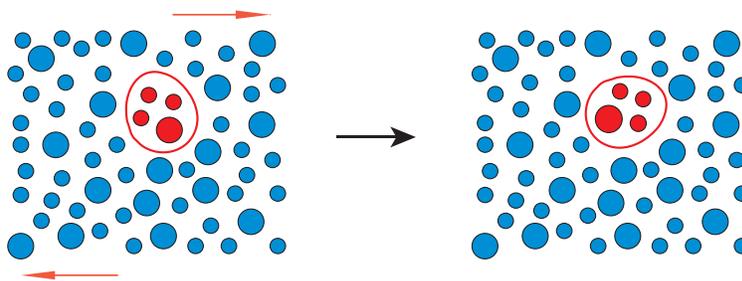


FIGURE 1.2: Schéma de réarrangement local d'une zone, "*shear transformation zones*" (*STZ*), un mécanisme élémentaire proposé pour les déformations plastiques dans les amorphes. (l'ellipse en rouge n'est utilisée qu'à titre indicatif)

Dans le prolongement de cette idée, les déformations plastiques macroscopiques sont décrites en partie par la succession de ces réarrangements individuels et localisés. Le but de ce travail est de construire un modèle statistique des enchaînements de ces événements plastiques. Pour ce faire, nous nous plaçons à une échelle mésoscopique, une échelle intermédiaire entre l'échelle des réorganisations locales et l'échelle continue. Nous allons démarrer avec cette idée comme mécanisme élémentaire pour construire un modèle nous permettant d'étudier les interactions entre ces réorganisations circonscrites dans des zones localisées.

1.2 Modèle statistique des réorganisations locales

Il est temps à présent de définir ce modèle simple à l'échelle mésoscopique qui va nous permettre de faire une analyse statistique et spatio-temporelle de la succession des événements plastiques et de mettre à jour des caractères universels de la plasticité des amorphes ou matériaux désordonnés. Il est nécessaire de préciser les deux ingrédients importants à prendre en compte :

- Hétérogénéité des critères locaux de plasticité (désordre).
- Redistribution des contraintes élastiques induites par un événement plastique.

Étant donné le caractère amorphe des matériaux étudiés ici, le premier ingrédient semble évident. Quant au deuxième, il n'est que la réponse élastique du système à un événement plastique. Cette redistribution contribuera à déclencher d'autres événements plastiques ailleurs dans le système. C'est ce qui va permettre la cascade de ces événements. Ces deux ingrédients sont le noyau de notre modèle. En délaissant tous les détails microscopiques et en ne gardant à l'esprit que ces ingrédients importants, nous construisons un modèle statistique de ces réarrangements atomiques pour étudier l'effet de l'hétérogénéité des critères locaux de plasticité et de la localisation des événements plastiques.

1.2.1 Déformation en géométrie plane

Pour ce projet, nous nous sommes restreints à des déformations d'un domaine bi-dimensionnel en géométrie plane. Le système modélisé correspond à un problème où le champ de déplacement est parallèle au plan xy , le plan du réseau lui-même (Fig. 1.3). Des études

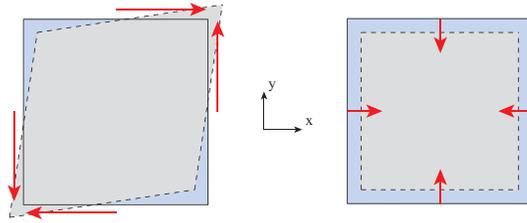


FIGURE 1.3: Système bi-dimensionnel en déformations planes. Exemples d'un cisaillement pur et d'une compression hydro-statique.

similaires ont été faites dans le cas des déformations en géométrie anti-plane [56] (dans lesquelles le déplacement est perpendiculaire au plan) et les résultats seront comparés au présent travail.

Pour le cas des déformations en géométrie plane, nous modélisons, en deux dimensions, un matériau élastiquement homogène. Le système est discrétisé en carrés élémentaires de manière à créer un réseau de zones mécaniques sous forme de grille. La taille de chaque carré élémentaire doit correspondre à la taille d'une ou de quelques *STZ* en vue d'être à l'échelle des mécanismes de réorganisations locales (Fig. 1.4). Chaque carré peut être répertorié par ses coordonnées¹, (i, j) ; $i \in \{1, \dots, L_x\}$, $j \in \{1, \dots, L_y\}$. De plus, afin d'éviter tout problème dû aux bords du système, nous définissons des conditions aux limites périodiques dans les deux directions pour modéliser un système 2D effectivement infini.

Dans ce travail de thèse, nous nous limitons au cas d'un cisaillement pur appliqué au matériau. Nous allons maintenant formuler une forte hypothèse sur le mécanisme des réorganisations locales :

- Nous supposons qu'un cisaillement plastique élémentaire, sous forme d'un réarrangement local, a la même symétrie que le cisaillement macroscopique appliqué.

¹ou par son indice, $k(i, j) = (j - 1)L_x + i$; $k \in \{1, \dots, L_x L_y\}$

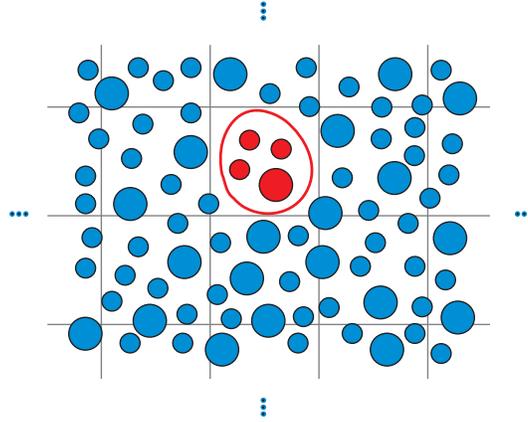


FIGURE 1.4: Discrétisation du matériau modélisé en un réseau bi-dimensionnel formé par des carrés élémentaires avec des conditions limites bi-périodiques.

Ceci nous permet d'exclure tout caractère aléatoire sur l'orientation de l'axe principal du cisaillement à l'échelle microscopique. De plus, travaillant avec un cas de cisaillement pur, nous nous limitons au terme ε_{xy} du champ de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$. Ce qui nous permet d'éliminer la prise en compte de tout changement volumétrique et de simplifier le modèle en le gardant scalaire.

1.2.2 Définition d'un critère local de plasticité

Étant donné le caractère amorphe des matériaux étudiés ici, les critères de plasticité sont locaux et hétérogènes. En respectant la géométrie choisie pour ce modèle, nous allons à présent définir un critère scalaire de plasticité. Au niveau microscopique, une région k cède lorsque $\sigma_{xy}(k) \geq \sigma_Y(k)$, où σ_{xy} est la contrainte de cisaillement, la projection de la contrainte totale $\boldsymbol{\sigma}$ sur le plan de déformation, et où σ_Y décrit le seuil local de plasticité. Pour préserver la nature amorphe de la classe de composé étudiée, ce seuil de plasticité $\sigma_Y(k)$, associé à chaque région k , est choisi de manière aléatoire avec une distribution donnée. Pour ce travail, nous emploierons une distribution de probabilité uniforme avec une fonction de densité :

$$f(\sigma_Y) = \begin{cases} 1 & \sigma_Y \in [0, 1] \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}, \quad (1.1)$$

et donc caractérisée par une moyenne $\mu = 0.5$ et un écart type $sd = 1/\sqrt{12}$.

La contrainte locale $\boldsymbol{\sigma}$ est la somme de la contrainte externe $\boldsymbol{\sigma}_{ext}$ appliquée uniformément et de la contrainte élastique interne $\boldsymbol{\sigma}_{el}$ induite par les réarrangements précédents ayant eu lieu ailleurs dans le système. Par conséquent, le critère de plasticité peut être réécrit comme suit :

$$\sigma_{ext} + \sigma_{el}(k) \geq \sigma_Y(k). \quad (1.2)$$

Une fois que ce critère est satisfait pour la région k , le matériau subit en cette région un glissement incrémental augmentant la déformation locale : $\varepsilon_{xy}(k) \rightarrow \varepsilon_{xy}(k) + \delta$. De même que pour les contraintes seuil, la valeur du glissement est tirée au sort avec une distribution uniforme entre 0 et δ_{max} , où δ_{max} est la valeur du glissement maximale choisie.

Ce glissement local induit en retour une contrainte élastique. Par la suite, une nouvelle contrainte seuil $\sigma_Y(k)$ est également choisie de manière aléatoire pour le site qui vient de plastifier k .

1.2.3 Dynamique extrême

Après avoir défini le critère local de plasticité, nous avons choisi d’animer le modèle avec une dynamique extrême en imposant des conditions quasi-statiques. Pour ce faire, la contrainte externe est ajustée de manière à plastifier un seul site à la fois. Nous forçons la contrainte de cisaillement $\sigma_{ext} = \sigma_c$ pour qu’un site seulement puisse glisser à la fois :

$$\sigma_c = \sigma_Y(k^*) - \sigma_{el}(k^*) = \min_k \{ \sigma_Y(k) - \sigma_{el}(k) \} \quad (1.3)$$

où k^* est le site extrême.

Dans le contexte de la plasticité des verres, la dynamique quasi-statique a été employée, par exemple, dans les travaux de *C.E. Maloney* et *A. Lemaître* [24] où ils déforment un système *Lennard-Jones* bi-dimensionnel en simple cisaillement. De plus, la dynamique extrême est une technique utilisée dans les modèles de type *pinning* pour se placer au plus près de la transition critique.

Ayant choisi la géométrie plane, défini un critère local de plasticité et opté pour une dynamique extrême, qu’en est-il de la réponse élastique à un événement plastique ?

1.3 Interaction élastique quadripolaire induite par une inclusion plastique

Afin de déterminer le champ élastique induit par un réarrangement individuel, nous utilisons le principe d’inclusion d’*Eshelby* [78]. Si une région, que l’on nommera inclusion, limitée par une surface dans un milieu isotrope et élastiquement homogène, se déforme plastiquement par un changement de forme ou de taille sans déformer de manière permanente le reste du système, que l’on nommera matrice, il est nécessaire que le tout se déforme élastiquement. Quel est le champ élastique de l’inclusion et de la matrice assurant la compatibilité des déplacements ?

1.3.1 Inclusion d’*Eshelby*

De manière schématique, l’inclusion est traitée séparément de la matrice (Fig. 1.5). On extrait du système la région qui nous intéresse. On la déforme de manière durable, ε_p . En vue de la remettre dans la cavité, des forces de surface sont appliquées induisant une déformation, ε_{el} , tel que $\varepsilon_{el} + \varepsilon_p = 0$, permettant donc de redonner à l’inclusion sa forme initiale. Ce qui, par la suite, induit des contraintes élastiques dans la matrice dues aux forces opposées à celles appliquées précédemment.

Il nous reste à définir à présent l’expression du champ élastique induit dans la matrice par la déformation plastique d’une inclusion donnée. Partant du quadripole de forces induit dans la matrice par la déformation plastique de l’inclusion (Fig. 1.5(4)), plusieurs démarches peuvent être utilisées dont celle présentée par *J. D. Eshelby* lui-même [78], et

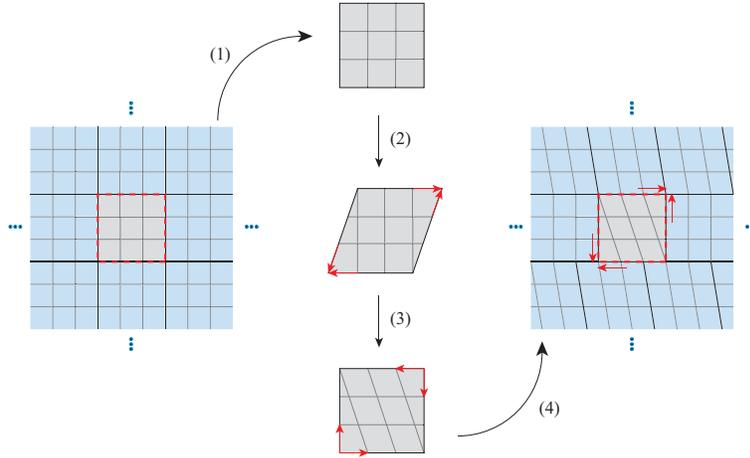


FIGURE 1.5: De manière schématique, une inclusion d'*Eshelby* est traitée comme suit : (1) "Extraire" l'inclusion. (2) Déformer l'inclusion plastiquement. (3) Appliquer un quadripôle de forces permettant de restituer la forme initiale ($\varepsilon_{el} + \varepsilon_p = 0$). (4) "Remettre" l'inclusion en place en appliquant un quadripôle de forces opposées induisant des contraintes élastiques à longue portée.

celle développée par *I. N. Sneddon* [84] se servant de ces forces ponctuelles. Pour notre part, nous avons pris le parti de recourir à une méthode basée sur les potentiels de *Kolossov-Muskhelichvili* [79]. Ces potentiels nous permettent de développer en premier lieu un calcul pour exprimer la réponse élastique à un événement plastique, présenté dans la sous-section qui suit, et en deuxième lieu une procédure pour identifier les événements plastiques partant du champ de déplacement et de ses dérivées, présenté en annexe (Annexe A).

1.3.2 Potentiels de *Kolossov-Muskhelichvili*

En deux dimensions, nous pouvons donc utiliser les potentiels *Kolossov-Muskhelichvili* (*K&M*) pour décrire les champs de contraintes et de déplacements élastiques. Nous utilisons le formalisme complexe, $z = x + iy$, ce qui nous permet d'exprimer le déplacement élastique, $\mathbf{U} = U_x + iU_y$, et le champ de contraintes en deux fonctions distinctes :

$$S_0 = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} \quad , \quad (1.4)$$

$$\mathbf{S} = \sigma_{yy} - \sigma_{xx} + 2i\sigma_{xy} \quad . \quad (1.5)$$

La densité de force bi-dimensionnelle appliquée est décrite par $\mathbf{F} = F_x + iF_y$. En utilisant ce formalisme, l'équation d'équilibre et l'équation de compatibilité peuvent être réécrites comme suit :

$$S_{0,z} - \mathbf{S}_{,\bar{z}} + \bar{\mathbf{F}} = 0 \quad , \quad (1.6)$$

$$S_{0,z\bar{z}} + \frac{1}{4(1-\nu)}(\mathbf{F}_{,z} + \mathbf{F}_{,\bar{z}}) = 0 \quad , \quad (1.7)$$

où ν est le coefficient de Poisson.

Les solutions générales de ces équations peuvent être obtenues en introduisant deux fonctions holomorphes φ et ψ , appelées potentiels de *K&M*. En supposant que la densité

de force à la surface est nulle, $\mathbf{F} = 0$, nous obtenons pour les champs de déplacements et de contraintes :

$$2\mu\mathbf{U} = \kappa\varphi(z) - \overline{z\varphi'(z)} - \overline{\psi(z)} \quad , \quad (1.8)$$

$$S_0 = 2[\varphi'(z) + \overline{\varphi'(z)}] \quad , \quad (1.9)$$

$$\mathbf{S} = 2[\overline{z}\varphi''(z) + \psi'(z)] \quad , \quad (1.10)$$

où μ est le module élastique et $\kappa = 3 - 4\nu$ en déformation plane et $\kappa = (3 - \nu)/(1 + \nu)$ en contrainte plane. Pour accéder aux contraintes, il est commode d'introduire la fonction :

$$\mathbf{K} = 2[\varphi(z) + \overline{z\varphi'(z)} + \overline{\psi(z)}] \quad . \quad (1.11)$$

Le vecteur de contraintes, sur une facette parallèle à la tangente de l'arc $z(s)$, peut être alors exprimé par :

$$\sigma_{nx} + i\sigma_{ny} = -\frac{i}{2}\mathbf{K}_{,s} \quad . \quad (1.12)$$

Nous pouvons maintenant appliquer ce formalisme $K\mathcal{E}M$ pour le problème bidimensionnel de la déformation plastique d'une inclusion. Nous avons deux solutions élastiques : à l'intérieur (φ^{in}, ψ^{in}) et à l'extérieur ($\varphi^{out}, \psi^{out}$) de l'inclusion. En supposant un caractère uniforme des contraintes internes, nous exprimons (φ^{in}, ψ^{in}) par des termes linéaires correspondant à des déformations uniformes et, pour l'extérieur de l'inclusion ($\varphi^{out}, \psi^{out}$), nous développons les potentiels $K\mathcal{E}M$ en fonctions de puissances. Ceci correspond à écrire :

$$\varphi(z)^{in} = \alpha^{in}z \quad , \quad \psi(z)^{in} = \beta^{in}z \quad , \quad (1.13)$$

$$\varphi(z) = \alpha^{out}z + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n}{z^n} \quad , \quad \psi(z) = \beta^{out}z + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n}{z^n} \quad . \quad (1.14)$$

Pour les conditions limites, les solutions des potentiels doivent être raccordées pour satisfaire la continuité du déplacement et du vecteur de contraintes à l'interface entre l'intérieur et l'extérieur de l'inclusion.

Faisant cas d'une déformation plastique en cisaillement δ d'une inclusion, nous définissons un "déplacement plastique" à la surface de l'inclusion :

$$U_{xp} = \delta y \quad , \quad (1.15)$$

$$U_{yp} = \delta x \quad , \quad (1.16)$$

par conséquent,

$$\mathbf{U}_p = U_{xp} + iU_{yp} = i\delta\overline{z} \quad , \quad (1.17)$$

dans le cas d'un cisaillement de l'inclusion².

Donc, pour satisfaire les conditions limites, nous avons :

$$\mathbf{U}_{el}^{in}(z) + i\delta\overline{z} = \mathbf{U}^{out}(z) \quad , \quad (1.18)$$

$$\mathbf{K}_{,s}^{in}(z) = \mathbf{K}_{,s}^{out}(z) \quad , \quad (1.19)$$

² $\mathbf{U}_p = \delta z$ dans le cas d'une compression / dilatation de l'inclusion

où $z = ae^{i\theta}$, le bord de l'inclusion circulaire de rayon a (soit $s = a\theta$ ou $z = ae^{is/a}$). De plus, pour assurer l'équilibre des contraintes à l'interface, il suffit d'imposer :

$$\mathbf{K}_{,s}^{in}(z) - \mathbf{K}_{,s}^{in}(a) = \mathbf{K}_{,s}^{out}(z) - \mathbf{K}_{,s}^{out}(a) \quad . \quad (1.20)$$

À l'intérieur de l'inclusion, nous obtenons :

$$2\mu\mathbf{U}_{el}^{in}(z) = (\kappa\alpha^{in} - \overline{\alpha^{in}})z - \overline{\beta^{in}\bar{z}} \quad , \quad (1.21)$$

$$\mathbf{K}^{in}(z) = 2(\alpha^{in} + \overline{\alpha^{in}})z + 2\overline{\beta^{in}\bar{z}} \quad , \quad (1.22)$$

puis, à l'extérieur de l'inclusion :

$$2\mu\mathbf{U}^{out}(z) = (\kappa\alpha^{out} - \overline{\alpha^{out}})z - \overline{\beta^{out}\bar{z}} \quad (1.23)$$

$$+ \kappa \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n}{z^n} + z \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\overline{\varphi_n}}{z^{n+1}} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\overline{\psi_n}}{z^n} \quad , \quad (1.24)$$

$$\mathbf{K}^{out}(z) = 2(\alpha^{out} + \overline{\alpha^{out}})z + 2\overline{\beta^{out}\bar{z}} \quad (1.25)$$

$$+ 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n}{z^n} - 2z \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\overline{\varphi_n}}{z^{n+1}} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\overline{\psi_n}}{z^n} \quad . \quad (1.26)$$

Les conditions limites sont satisfaites en imposant :

$$\varphi_n = \frac{2i\mu}{\kappa+1} a^2 \delta \delta_{n1} \quad , \quad (1.27)$$

$$\psi_m = \frac{2i\mu}{\kappa+1} a^4 \delta \delta_{m3} \quad . \quad (1.28)$$

où δ_{ij} est le symbole de *Kronecker* (δ_{ij} vaut 1 pour $i = j$ et 0 pour $i \neq j$). Ce qui nous permet de calculer les contraintes élastiques à l'extérieur de l'inclusion :

$$S_0 = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} = 2[\varphi'(z) + \overline{\varphi'(z)}] = \frac{4\mu\delta a^2}{\kappa} \frac{a^2}{r^2} \sin 2\theta \quad , \quad (1.29)$$

$$\mathbf{S} = \sigma_{yy} - \sigma_{xx} + 2i\sigma_{xy} = 2[\overline{z}\varphi''(z) + \psi'(z)] = \frac{4\mu i \delta a^2}{\kappa} \frac{a^2}{r^2} e^{-4i\theta} \left(1 - 3\frac{a^2}{r^2}\right) \quad , \quad (1.30)$$

et à l'ordre dominant, nous obtenons :

$$\sigma_{xy} = -\frac{2\mu a^2 \delta}{\kappa} \frac{a^2}{r^2} \cos 4\theta \quad \text{pour } r > a \quad (1.31)$$

pour la contrainte élastique dans le cas d'une déformation plastique en cisaillement. Cette réponse élastique a la propriété d'avoir une symétrie quadripolaire et d'avoir un champ d'application à longue portée.

L'intérêt de ce calcul est son caractère illustratif et générique. Par l'utilisation des potentiels de *Kolossov-Muskhelichvili*, les termes additionnels, nécessaires à la description d'une déformation en cisaillement d'une inclusion de forme quelconque, "disparaissent" à longue portée. Pour le cas d'un cisaillement local, seul importera l'ordre dominant caractérisé par une symétrie quadripolaire et une amplitude proportionnelle à $A\delta$, le produit de l'aire de l'inclusion A par la déformation plastique δ (pour une inclusion circulaire de rayon a : $a^2\delta$).

1.4 Algorithme

Dans cette géométrie bi-dimensionnelle où ne s'appliquent que des déformations en cisaillement pur, ce modèle est scalaire. Donc, chaque site est caractérisé par une contrainte de cisaillement $\sigma_{el}(k)$, par un critère de plasticité $\sigma_Y(k)$ et par une valeur de déformation plastique $\varepsilon_p(k)$. Pour commencer, nous choisissons aléatoirement le seuil de plasticité $\sigma_Y(k)$ pour chaque site k . Ci-dessous, nous présentons un algorithme schématique du déroulement du modèle :

1. Identifier le site extrémal, le site le "plus faible", k^* :

$$\sigma_c = \sigma_Y(k^*) - \sigma_{el}(k^*) = \min_k (\sigma_Y(k) - \sigma_{el}(k)) \quad . \quad (1.32)$$

2. Déformer plastiquement le site k^* en sélectionnant aléatoirement un incrément de déformation locale, δ :

$$\Delta\varepsilon_p(k^*) = \delta \quad , \quad (1.33)$$

$$\varepsilon_p(k^*) \rightarrow \varepsilon_p(k^*) + \Delta\varepsilon_p(k^*) \quad . \quad (1.34)$$

3. Redistribuer les contraintes élastiques sur tout le système par l'intermédiaire d'une fonction de *Green*, \mathbf{G} :

$$\Delta\sigma_{el}(k) = G(k, k^*) \cdot \Delta\varepsilon_p(k^*) \quad , \quad (1.35)$$

$$\sigma_{el}(k) \rightarrow \sigma_{el}(k) + \Delta\sigma_{el}(k) \quad . \quad (1.36)$$

4. Sélectionner aléatoirement une nouvelle contrainte seuil, $\sigma_Y(k^*)$, pour le site qui vient de céder.

puis réitérer ces étapes. Dans le chapitre suivant, nous nous appliquerons à construire la fonction de *Green*, \mathbf{G} , à l'aide de l'équation analytique 1.31, représentant la réponse élastique à une déformation plastique en cisaillement δ .

1.5 Conclusion

Partant de l'hypothèse que la déformation plastique macroscopique est une succession de réorganisations individuelles et localisées, nous avons développé un modèle pour étudier le comportement plastique des matériaux amorphes. Après avoir défini un critère local de plasticité et opté pour une dynamique extrémale, ce modèle bi-dimensionnel en géométrie plane nous permettra d'analyser les corrélations spatio-temporelles entre ces réarrangements et les transitions critiques tel un modèle de *pinning*. L'expression de la contrainte de cisaillement (Eq. 1.31) due à une déformation plastique en cisaillement servira à élaborer la fonction de *Green* du modèle dont l'implémentation numérique sera développée dans le chapitre suivant.

Chapitre 2

Mise en œuvre numérique de la réponse élastique à un événement plastique

Au cours du développement du modèle mésoscopique discuté plus haut, il est apparu que le comportement du modèle, notamment en terme de localisation, était particulièrement sensible aux détails de l'implémentation numérique de la fonction de réponse élastique.

Dans le présent chapitre, nous allons donc exposer les détails numériques de cette fonction de réponse élastique à un événement plastique. Cette réponse, que nous appellerons pour plus de commodité la fonction de *Green*, est la pierre angulaire de ce modèle. Nous passerons du temps à présenter toutes les étapes nécessaires à la construction de sa version discrète en nous attardant sur la difficile prise en compte des conditions aux limites. Le calcul du spectre des valeurs propres associé à cet opérateur nous permettra de caractériser la dynamique résultante de l'utilisation des différentes méthodes de discrétisation de la fonction de *Green*. En particulier, nous montrerons l'intérêt d'une discrétisation dans l'espace de *Fourier*.

2.1 Discrétisation dans l'espace direct

À partir de la connaissance de l'expression analytique continue du champ élastique dû à une déformation plastique en cisaillement d'une inclusion (Eq. 1.31), nous cherchons à discrétiser cette formule pour pouvoir l'utiliser sur un réseau bi-dimensionnel carré. Il faudra de plus prendre en compte l'effet des multiples répliques dues au choix de travailler avec des conditions aux limites périodiques.

Reformulons l'expression continue de la fonction de *Green*. Une déformation plastique en cisaillement δ d'une inclusion circulaire de rayon a sera la source S , localisée en \mathbf{r}_S , d'un incrément de contrainte de cisaillement à tout point P , \mathbf{r}_P , à l'extérieur de l'inclusion, $r = \|\mathbf{r}_P - \mathbf{r}_S\| > a$:

$$\Delta\sigma_{el} = -\delta\frac{a^2}{r^2}\cos 4\theta = \delta\frac{a^2}{r^2}\left(8\frac{x^2y^2}{r^4} - 1\right) \quad , \quad (2.1)$$

où nous imposons $2\mu/\kappa = 1$ pour les constantes mécaniques. Nous discrétisons le milieu continu avec un maillage bi-dimensionnel par des éléments carrés. La taille des ces carrés

élémentaires doit nous permettre d'imbriquer, de manière similaire aux *STZ*, une inclusion de rayon a . Nous fixons donc le diamètre de l'inclusion égal à la longueur de l'arête du carré unitaire, $2a = 1$ (Fig. 2.1).

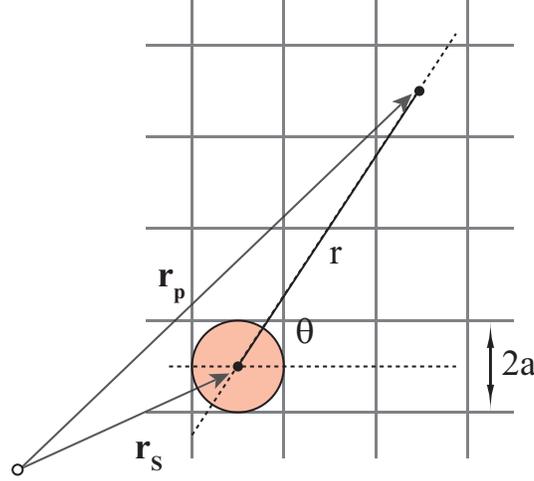


FIGURE 2.1: Représentation d'une inclusion circulaire, en rouge, sur un réseau bi-dimensionnel discrétisé en carrés élémentaires.

La contrainte élastique locale σ_{el} s'exprime par une convolution de la fonction de Green \mathbf{G} avec la déformation plastique macroscopique ε_p :

$$\sigma_{el} = \mathbf{G} * \varepsilon_p \quad . \quad (2.2)$$

Ainsi, l'incrément de contrainte élastique au site k , $\Delta\sigma_{el}(k)$, due à une déformation plastique en cisaillement $\Delta\varepsilon_p(k^*) = \delta$ au site k^* , s'exprime comme suit :

$$\Delta\sigma_{el}(k) = G(k; k^*) \cdot \Delta\varepsilon_p(k^*) \quad . \quad (2.3)$$

Pour respecter toutes les conditions mécaniques et les principes de notre modèle, il est nécessaire que :

$$\sum_{\forall k} G(k; k^*) = 0 \quad , \quad G(k^*; k^*) = -1 \quad . \quad (2.4)$$

L'incrément macroscopique de contrainte de cisaillement élastique doit être nul et la relaxation locale au site qui a plastifié doit être égale à $-\delta$.

2.1.1 Application d'une déformation plastique en cisaillement pur

Si nous revenons maintenant à la réponse élastique à une déformation plastique en cisaillement pur du site $k^*(i^*, i^*)$, nous pouvons réécrire l'équation 2.1 pour chaque site $k(i, j)$, où $r^2 = (i - i^*)^2 + (j - j^*)^2 > a^2$, comme suit :

$$G\left(k(i, j); k^*(i^*, i^*)\right) = \frac{1}{4((i - i^*)^2 + (j - j^*)^2)} \left[8 \frac{(i - i^*)^2 (j - j^*)^2}{((i - i^*)^2 + (j - j^*)^2)^2} - 1 \right] \quad . \quad (2.5)$$

Cette valeur est ponctuelle et calculée au centre du site. Plutôt que d'utiliser directement l'équation analytique en affectant une valeur ponctuelle à chaque centre de site du réseau bi-dimensionnel, il est aussi possible d'attribuer à chaque site une valeur intégrée sur la totalité du carré élémentaire en moyennant sur l'ensemble du site. Nous verrons que ces deux variantes de discrétisation dans l'espace direct peuvent donner lieu à des comportements différents.

2.1.2 Conditions limites bi-périodiques

Des conditions limites bi-périodiques sont imposées au système. De fait, les propriétés mécaniques de la cellule $k(i, j)$ sont identiques à celles de la (R_x, R_y) ème réplique, $k(i + R_x L_x, j + R_y L_y)$, où $R_x, R_y \in \mathbb{Z}$. Donc, la contrainte de cisaillement au site $k(i, j)$ est due à l'effet de la source $k^*(i^*, j^*)$ et de toutes ses répliques. En faisant tendre le nombre de répliques, R , vers l'infini, la fonction de *Green* s'exprime comme suit :

$$G\left(k(i, j); k^*(i^*, j^*)\right) = \lim_{R \rightarrow \infty} \sum_{R_x=-R}^R \sum_{R_y=-R}^R G\left(k(i, j); k^*(i^* + R_x L_x, j^* + R_y L_y)\right) \quad . \quad (2.6)$$

En l'absence de résultat exact sur la forme de cette somme infinie, nous allons chercher à en donner une extrapolation numérique. Pour ce faire, nous définissons une fonction f , telle que :

$$f(1/R) = G_R\left(k(i, j); k^*(i^*, j^*)\right) = \sum_{R_x=-R}^R \sum_{R_y=-R}^R G\left(k(i, j); k^*(i^* + R_x L_x, j^* + R_y L_y)\right) \quad . \quad (2.7)$$

Par une extrapolation *via* une regression polynômiale de G_R en fonction de $1/R$ (Fig. 2.2), nous pouvons approximer :

$$G\left(k(i, j); k^*(i^*, j^*)\right) = \lim_{R \rightarrow \infty} G_R\left(k(i, j); k^*(i^*, j^*)\right) \quad (2.8)$$

$$= \lim_{R \rightarrow \infty} f(1/R) \quad (2.9)$$

$$= f(0) \quad . \quad (2.10)$$

2.1.3 Fonction de *Green* normalisée et respectant la condition d'équilibre

La limitation de la méthode d'extrapolation décrite ici est évidemment sa dépendance envers la géométrie du contour choisi (pour nous, un carré centré sur l'inclusion plastique) pour calculer les sommes finies. Ce qui ne permet pas de garantir la condition d'équilibre $\sum_{\forall k} G(k, k^*) = 0$.

Nous n'avons pas cherché à mettre en œuvre ici des méthodes de type sommation d'*Ewald*, utilisées pour calculer les interactions coulombiennes en géométrie périodique.

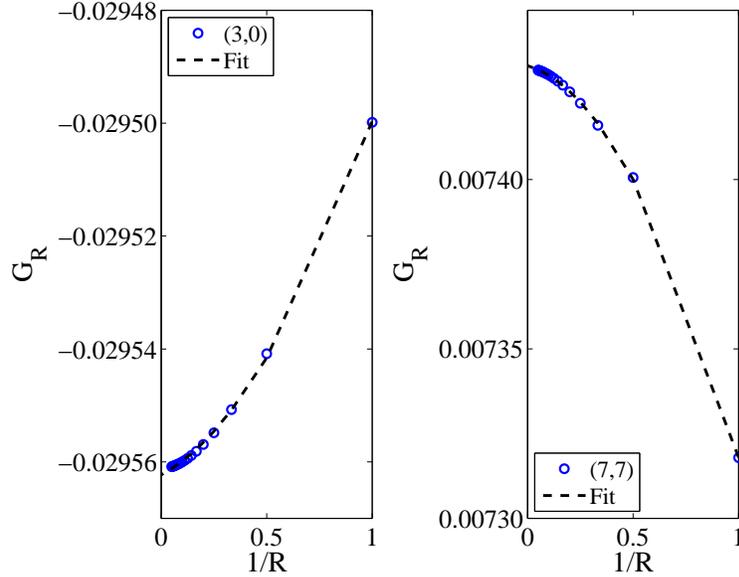


FIGURE 2.2: La réponse élastique, G_R , induite par le site $(0, 0)$ à deux différents sites, $(3, 0)$ et $(7, 7)$, calculée en fonction du nombre de répliques pris en compte pour un système de taille 16×16 , avec une régression quadratique - en pointillés.

Nous nous sommes d'abord contentés d'ajouter un terme de type champ moyen pour satisfaire la condition d'équilibre.

Nous devons à présent faire en sorte que la fonction de *Green* respecte la condition d'équilibre et qu'elle soit normalisée pour valider les équations 2.4. Pour ce faire, nous définissons la somme S_G pour chaque inclusion k^* , tel que :

$$S_G(k^*) = \sum_{\forall k} G(k, k^*) \quad . \quad (2.11)$$

Comme évoqué plus haut, l'intégrale de $\cos 4\theta$ entre 0 et 2π doit être égale à zéro mais, en raison du schéma de discrétisation employé, la somme $S_G(k^*)$ n'est pas totalement nulle. Donc, nous redéfinissons la valeur de $G(k^*; k^*)$:

$$G(k^*; k^*) \rightarrow G(k^*; k^*) - S_G(k^*) \quad , \quad (2.12)$$

et imposons que la somme soit nulle et que la fonction de *Green* respecte la condition d'équilibre. Il reste maintenant à normaliser le tout en redéfinissant les entrées de chaque inclusion k^* :

$$G(k; k^*) \rightarrow -G(k; k^*)/G(k^*; k^*) \quad , \quad (2.13)$$

pour que $G(k^*; k^*)$ soit égale à -1 .

2.1.4 Fonction de *Green* "réduite"

Nous avons pris le parti de travailler avec un matériau élastiquement homogène. La réponse élastique ne dépend pas du site extrémal k^* mais plutôt de sa position relative par rapport aux autres sites du réseau bi-dimensionnel. Donc, il n'est nécessaire

de calculer la fonction de *Green* qu'une seule fois. Nous définissons une fonction de *Green* "réduite" représentant la réponse au site extrémal situé au centre du système, $k^*(i^*, j^*) = k^*(L_x/2, L_y/2)$:

$$G_r(k(i, j)) = G(k(i, j); k^*(L_x/2, L_y/2)) \quad . \quad (2.14)$$

et nous n'aurons plus qu'à superposer \mathbf{G}_r au réseau lui-même de manière à la centrer sur le site source voulu tout en tenant compte des conditions limites périodiques (Fig. 2.3). Autrement dit, nous pouvons réécrire l'équation comme suit :

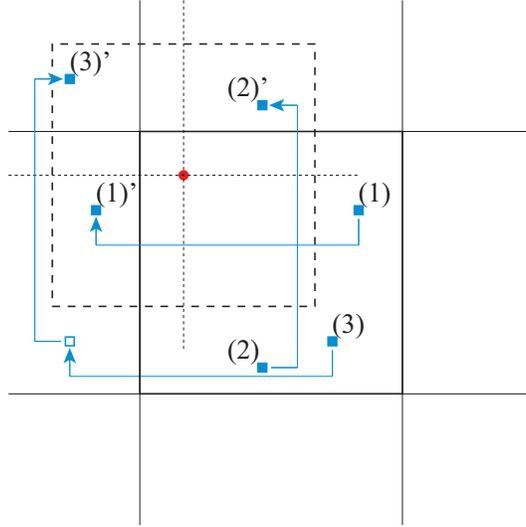


FIGURE 2.3: Superposition de la fonction de *Green* "réduite", en pointillé, sur un système bi-dimensionnel en la centrant sur le site extrémal, en rouge, simulant un matériau élastiquement homogène avec des conditions limites bi-périodiques où, par exemple, l'effet de la déformation induit, aux sites (1), (2) et (3), le même incrément de cisaillement qu'aux sites (1)', (2)' et (3)', respectivement.

$$\Delta\sigma_{el}(k(i, j)) = G_r(k'(i', j')) \cdot \Delta\varepsilon_p(k^*(i^*, j^*)) \quad , \quad (2.15)$$

avec,

$$i' = (i - i^* + 3L_x/2 - 1)\%L_x + 1 \quad , \quad (2.16)$$

$$j' = (j - j^* + 3L_y/2 - 1)\%L_y + 1 \quad , \quad (2.17)$$

où % représente l'opération modulo, le reste de la division entière.

2.1.5 Fonction de *Green* opérationnelle obtenue par discrétisation dans l'espace direct

Donc, après avoir adapté l'équation analytique 2.1 à un réseau bi-dimensionnel, pris en compte les conditions limites bi-périodiques, additionné un terme de type champ moyen et

normalisé le résultat, une fonction de *Green* est prête à être utilisée. Nous pouvons très bien voir sur la Fig. 2.4, illustrant la fonction de *Green*, \mathbf{G}_r , pour un système de taille $L = 32$ avec une inclusion au centre du système, une symétrie quadripolaire due au terme $\cos 4\theta$. Cette symétrie quadripolaire se traduit, avec une inclusion à l'origine et un incrément de déformation plastique $\Delta\varepsilon_p = \delta$ positif, par un incrément de contrainte élastique $\Delta\sigma_{el}$ négatif le long des axes en $\theta = 0, \pi/2$ et positif le long des axes en $\theta = \pi/4, 3\pi/4$ (Fig. 2.4).

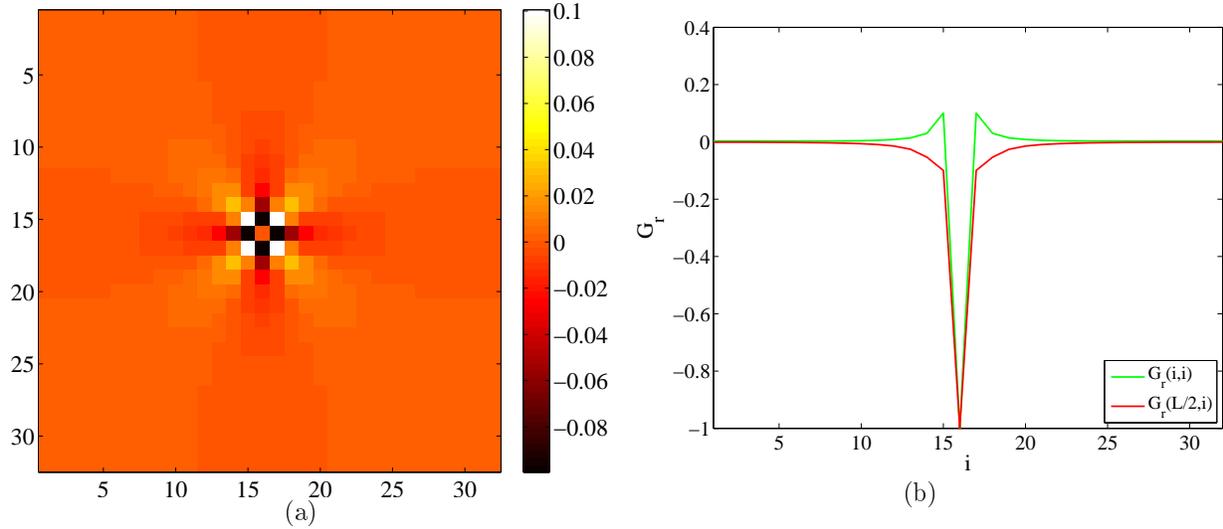


FIGURE 2.4: (a) Fonction de *Green*, \mathbf{G}_r , représentant la réponse élastique à une déformation plastique en cisaillement au centre d'un système de taille $L = 32$; où, pour faciliter la visualisation, la valeur à l'inclusion a été arbitrairement mise à zéro. (b) Sections de la fonction de *Green* passant par le centre du système : la contrainte élastique σ_{el} diminue le long des axes en $\theta = 0, \pi/2$ et augmente le long des axes en $\theta = \pi/4, 3\pi/4$ pour un incrément de déformation plastique, δ , positif.

2.2 Caractérisation de la dynamique du modèle par analyse des valeurs propres

Comme discuté dans le chapitre précédent, le modèle de plasticité des amorphes présenté dans ce travail est mis en œuvre à l'aide d'une dynamique de type extrême : le seuil de contrainte externe σ_c est ajusté de manière à satisfaire un critère local :

$$\sigma_c = \sigma_Y(k^*) - \sigma_{el}(k^*) = \min_k \{ \sigma_Y(k) - \sigma_{el}(k) \} \quad (2.18)$$

Pour mieux caractériser ce type de dynamique, nous nous intéressons aux valeurs propres de la fonction de *Green*. Notons λ_n les valeurs propres classées en ordre croissant et e_n les vecteurs propres associés normalisés. Étant donné que l'opérateur \mathbf{G} utilisé pour calculer la réponse élastique à une déformation plastique (Eq. 2.2) est une matrice circulante, une

matrice carrée dans laquelle on passe d'une ligne à la suivante par permutation circulaire (décalage vers la droite) des coefficients, ses valeurs propres peuvent être obtenues directement par la transformation de *Fourier* discrète de sa forme "réduite" \mathbf{G}_r .

Une déformation plastique cumulée ε_p , proportionnelle au vecteur propre e_n , induit une contrainte élastique locale $\sigma_{el} = \lambda_n e_n$. Puisque le modèle est animé par une dynamique extrême *via* l'identification du seuil minimal, sa dynamique propre est contrôlée par le mode dominant de la fonction de *Green* correspondant à la plus grande des valeurs propres, λ_1 . Le signe de cette valeur influe sur le comportement du modèle de telle sorte que si :

- $\lambda_1 > 0$: nous obtenons un comportement adoucissant avec une pente λ_1 ; un comportement engendrant une localisation des événements plastiques,
- $\lambda_1 < 0$: nous obtenons un comportement durcissant avec une pente λ_1 ; un comportement qui force une déformation plastique homogène à grande échelle,
- $\lambda_1 = 0$: nous obtenons un régime stationnaire.

Nous montrerons dans la suite que l'analyse des valeurs propres de l'opérateur de *Green* permet de relire simplement les comportements obtenus avec différents schémas de discrétisation dans l'espace direct. Nous donnerons une première illustration avec une réponse de type champ moyen. Puis, nous montrerons les résultats correspondant à deux choix de discrétisation de l'interaction quadripolaire apparemment très proches mais qui, finalement, *via* leur effet sur le signe de la valeur propre maximale, ont des effets dramatiques sur la dynamique et le comportement de localisation du modèle.

2.2.1 Illustration avec une réponse de type champ moyen

Pour une redistribution élastique de type champ moyen, *Mean Field (MF)*, où la contribution en chaque point, autre que le site extrême, est identique et inversement proportionnelle à la taille du système,

$$G_{MF}(k; k^*) = \begin{cases} 1/(L^2 - 1) & \text{pour } k \neq k^* \\ -1 & \text{pour } k = k^* \end{cases} \quad (2.19)$$

le spectre des valeurs propres est réduit à deux valeurs : $\lambda_1 = 0$ et $\lambda_2 = -1$ dégénérée $L^2 - 1$ fois (Fig. 2.5).

Si nous voulons à présent avoir une indication sur la dynamique résultant d'une telle fonction de *Green*, nous pouvons regarder de plus près une carte des sites actifs durant un certain nombre de pas de temps, Δt , et ceci à un stade bien avancé de la simulation. Notons ici que les sites les plus foncés sont les plus actifs. Les cartes présentées sur la figure 2.6 nous permettent de constater une distribution homogène de l'activité sur l'ensemble du système et pour différentes tailles de fenêtre temporelle.

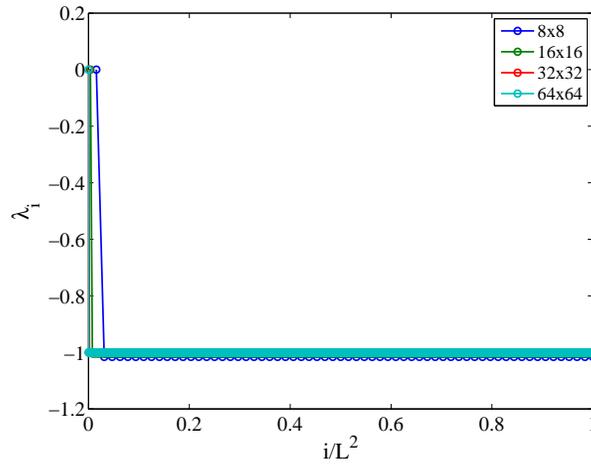


FIGURE 2.5: Spectre des valeurs propres de la distribution en champ moyen (MF) pour différentes tailles de système ; nous remarquons qu'il est restreint à deux valeurs : $\lambda_1 = 0$ et $\lambda_i = -1$ pour $i = 2, \dots, L^2$.

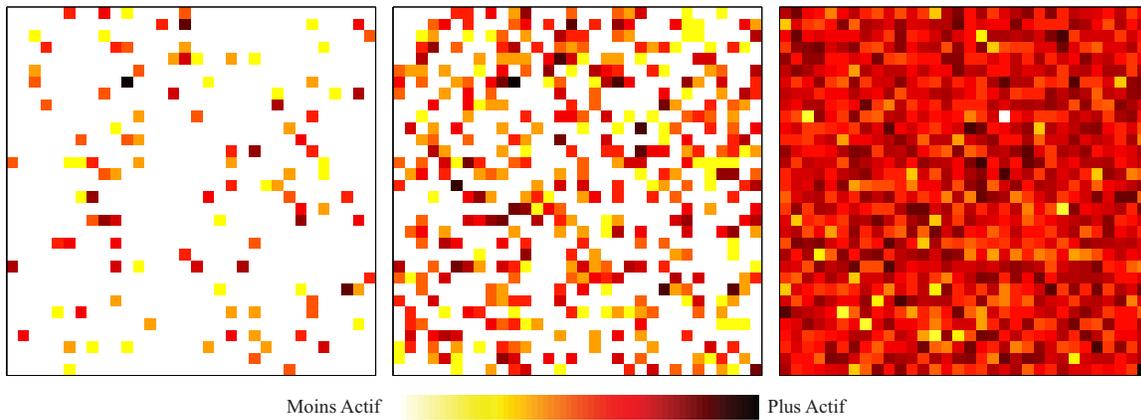


FIGURE 2.6: Cartes d'activité cumulée avec une fonction de *Green* en champ moyen ; pour un système $L = 32$ durant $\Delta t = 2^8, 2^{11}, 2^{14}$ (de gauche à droite) : une activité distribuée de manière homogène.

2.2.2 Cas avec des valeurs propres positives

Lors de la section précédente, nous avons exposé la version discrète 2.5 de l'équation continue 2.1 utilisée pour construire la distribution des contraintes élastiques en réponse à une déformation plastique d'une inclusion en cisaillement. Si nous utilisons directement la valeur ponctuelle en chaque site, la fonction de *Green* possède des valeurs propres positives (Fig. 2.7).

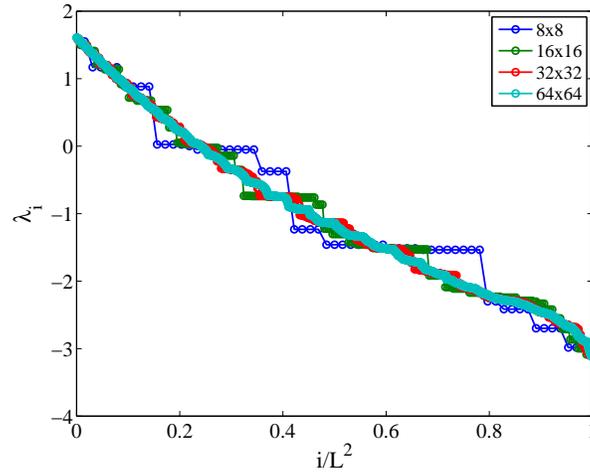


FIGURE 2.7: Spectre des valeurs propres de la fonction de *Green* construite avec les valeurs ponctuelles en chaque site pour différentes tailles de système ; nous observons des valeurs propres positives.

La dynamique a un comportement adoucissant. Ceci cause une délimitation des événements plastiques dans le système que nous pouvons clairement voir sur les cartes d'activité présentées sur la figure 2.8. L'activité est localisée dans l'espace et est persistante dans le temps.

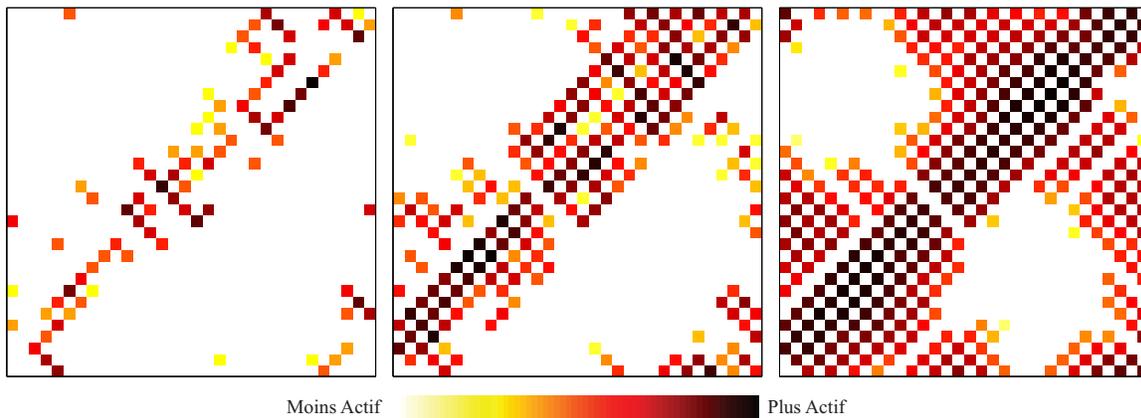


FIGURE 2.8: Cartes d'activité cumulée avec une fonction de *Green* possédant des valeurs propres positives ; pour un système $L = 32$ durant $\Delta t = 2^8, 2^{11}, 2^{14}$ (de gauche à droite) : localisation des événements plastiques.

2.2.3 Cas avec une discontinuité du spectre des valeurs propres

Cette fois-ci, si nous construisons la distribution des contraintes élastiques en utilisant la valeur moyenne en chaque site partant de l'équation discrete 2.5, nous pouvons observer une discontinuité du spectre des valeurs propres (Fig. 2.9). Un écart existe entre la plus grande et la seconde plus grande valeur propre.

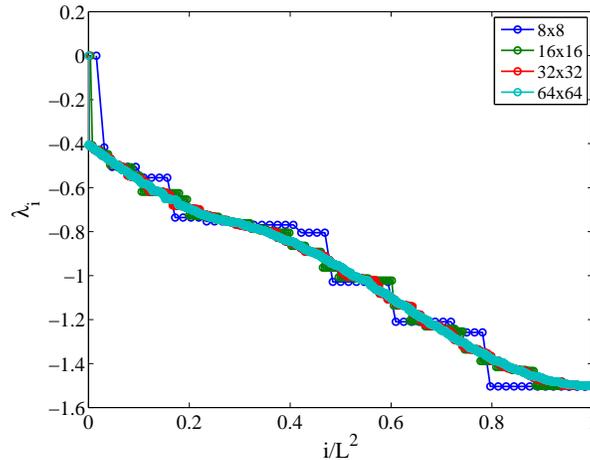


FIGURE 2.9: Spectre des valeurs propres de la fonction de *Green* pour différentes tailles de système ; nous observons un écart entre les deux plus grandes valeurs propres.

Cet écart est attribué au champ moyen car il provoque une dynamique comparable à celle observée pour une distribution en champ moyen. L'activité est légèrement corrélée mais avec un fort caractère homogène dû au champ moyen (Fig. 2.10).

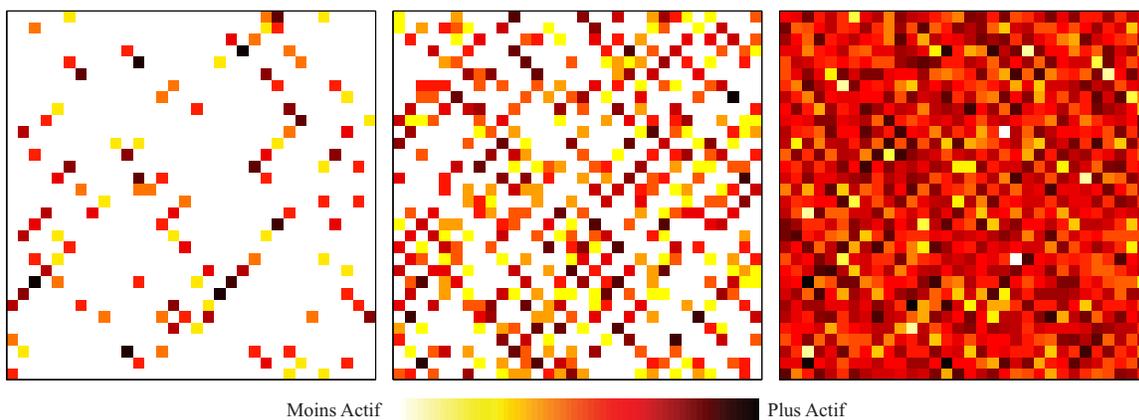


FIGURE 2.10: Cartes d'activité cumulée avec une fonction de *Green* possédant un écart entre les deux plus grandes valeurs propres ; pour un système $L = 32$ durant $\Delta t = 2^8, 2^{11}, 2^{14}$ (de gauche à droite) : activité très affectée par le champ moyen.

2.3 Discrétisation dans l'espace de *Fourier*

L'extrême sensibilité de la dynamique au schéma de discrétisation dans l'espace direct nous a naturellement incité à travailler dans l'espace de *Fourier* (ce point avait d'ailleurs été évoqué par *G. Picard* et *coll.* [85]). La pertinence de cette démarche est ici accentuée par l'identité du spectre des valeurs propres de l'opérateur de *Green* avec la transformée de *Fourier* de la fonction de *Green* "réduite" \mathbf{G}_r .

Pour garantir la stabilité du modèle et respecter la décroissance en loi de puissance des interactions élastiques, les valeurs propres de la fonction de *Green* doivent posséder les propriétés suivantes :

1. La plus grande valeur propre doit être égale à zéro et toutes les autres valeurs propres doivent être négatives.
2. Le spectre des valeurs propres doit être continu en zéro.

Puisque les valeurs propres de \mathbf{G} peuvent être obtenues directement par la transformation de *Fourier* discrète de sa forme "réduite" \mathbf{G}_r , nous pouvons à l'inverse imposer un spectre de valeurs propres de manière à respecter les propriétés ci-haut tout en ayant une fonction de *Green* avec une symétrie quadripolaire. Pour ce faire, nous représentons la transformation de *Fourier* discrète de \mathbf{G}_r comme suit :

$$\tilde{\mathbf{G}}_r(\tilde{k}(\tilde{i}, \tilde{j})) = \begin{cases} -\cos 4\tilde{\theta} - 1 & \text{pour } \tilde{k} \neq \tilde{k}^* \\ -1 & \text{pour } \tilde{k} = \tilde{k}^* \end{cases}, \quad (2.20)$$

où $\tilde{k}(\tilde{i}, \tilde{j})$ sont les coordonnées et $\tilde{\theta}$ est l'angle polaire dans l'espace *Fourier* (Fig. 2.11). Le terme -1 définit une fonction de *Dirac* représentant la relaxation de la contrainte élastique au site plastifié.

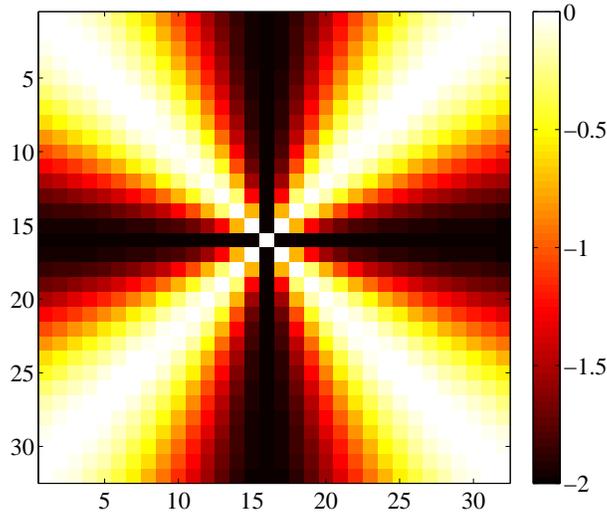


FIGURE 2.11: Fonction de *Green* dans l'espace *Fourier*, $\tilde{\mathbf{G}}_r$, avec des valeurs toutes plus petites ou égales à zéro.

Nous obtenons la nouvelle fonction de *Green* en passant dans l'espace direct par une transformation de *Fourier* discrète inverse en deux dimensions :

$$\mathbf{G}_r(k(i, j)) = FFT^{-1} \tilde{\mathbf{G}}_r(\tilde{k}(\tilde{i}, \tilde{j})) \quad . \quad (2.21)$$

Après l'avoir normalisée et ajustée pour respecter les conditions d'équilibre comme imposé par (Eq. 2.4), nous pouvons vérifier qu'elle possède la même symétrie quadripolaire que celle calculée précédemment (Fig. 2.12).

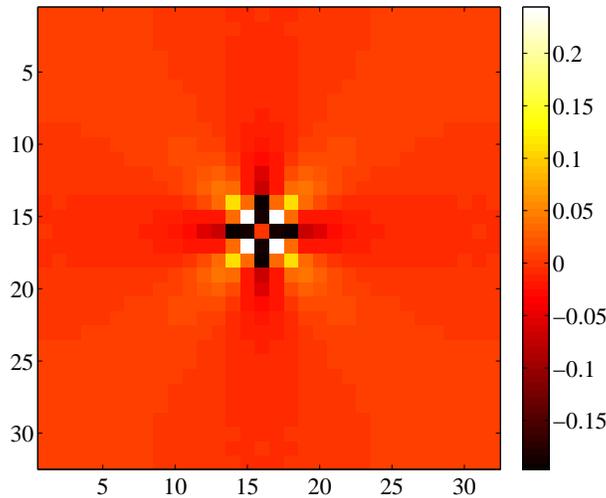


FIGURE 2.12: Fonction de *Green*, G_r , calculée par discrétisation dans l'espace de *Fourier*, représentant la réponse élastique à une déformation plastique en cisaillement au centre d'un système de taille $L = 32$; où, pour faciliter la visualisation, la valeur à l'inclusion a été arbitrairement mise à zéro.

Par définition, les valeurs propres possèdent ici les propriétés voulues : elles sont toutes plus petites ou égales à zéro et leur spectre est continu en zéro (Fig. 2.13).

Contrairement aux cas présentés antérieurement, les cartes d'activité issues de la fonction de *Green* calculée par transformation de *Fourier* discrète ne révèlent aucune localisation persistante des sites actifs (Fig. 2.10). En outre, la dynamique ne semble pas être dominée par le champ moyen car nous pouvons facilement observer une corrélation entre les événements plastiques, une corrélation que nous examinerons au chapitre 4.

2.4 Conclusion

Après avoir présenté toutes les étapes nécessaires à la construction de la fonction de *Green* discrète partant de son expression analytique, nous avons clairement remarqué que c'est un objet très sensible aux détails numériques et à la manière avec laquelle nous discrétisons l'expression analytique et prenons en compte les conditions aux limites dans l'espace direct. Néanmoins, nous avons développé une méthode basée sur le calcul de ses valeurs propres pour caractériser la dynamique d'un modèle utilisant une fonction de *Green* donnée. En outre, l'identité de la transformée de *Fourier* de la fonction de *Green* "réduite", \mathbf{G}_r , avec le spectre des valeurs propres de l'opérateur de *Green* nous a permis

de mettre en place une fonction de *Green* avec les propriétés souhaitées en opérant une discrétisation dans l'espace de *Fourier* plutôt que dans l'espace direct.

Chapitre 3

Comportement macroscopique

Nous allons à présent explorer les résultats macroscopiques du modèle statistique bi-dimensionnel développé précédemment. Celui-ci exhibe, à l'échelle macroscopique, un comportement plastique caractérisé par deux régimes distincts clairement observés lorsque nous suivons l'évolution de la limite élastique. Le premier régime, transitoire, voit la croissance progressive de la limite élastique au cours du chargement, ce qui du point de vue mécanique correspond à un phénomène d'écrouissage. Le second régime, stationnaire, est marqué par la saturation de la limite élastique.

Dans ce qui suit, après un rappel succinct de mécanique des milieux continus, nous nous attacherons à discuter l'effet des paramètres du modèle sur le seuil d'écoulement plastique. Puis, nous donnerons une interprétation statistique du phénomène d'écrouissage observé dans ce modèle.

3.1 Rappels de mécanique des milieux continus

Si l'on considère un matériau isotrope homogène soumis à une sollicitation mécanique (une simple traction, par exemple), on constate qu'il est possible de définir deux étapes avec des comportements différents (Fig. 3.1).

Dans un premier temps, la déformation du matériau est réversible et proportionnelle à la contrainte subie : on parle de comportement "élastique linéaire" (sur le diagramme 3.1, le chargement et le déchargement se font le long du chemin OA). La relation entre la contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ appliquée et la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ subie par le matériau dépend alors exclusivement de deux paramètres intrinsèques au matériau, le module de Young E et le coefficient de Poisson ν compris entre -1 et 0.5 , par le biais de la loi de Hooke :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1 + \nu}{E} \boldsymbol{\sigma} - \frac{\nu}{E} Tr(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{I} \quad (3.1)$$

où \mathbf{I} est la matrice unité et $Tr(\boldsymbol{\sigma})$ est la trace du tenseur des contraintes.

Dans un second temps, au-delà d'une contrainte seuil σ_{Y0} , dite "limite élastique", une déformation irréversible $\boldsymbol{\varepsilon}_p$, dite "plastique", s'ajoute à la déformation élastique réversible, $\boldsymbol{\varepsilon}_{el}$. Pour un chargement au-delà de A et jusqu'à B sur le schéma, le déchargement suit le chemin BC (et non le trajet BAO) avec une déformation résiduelle OC. Le prochain

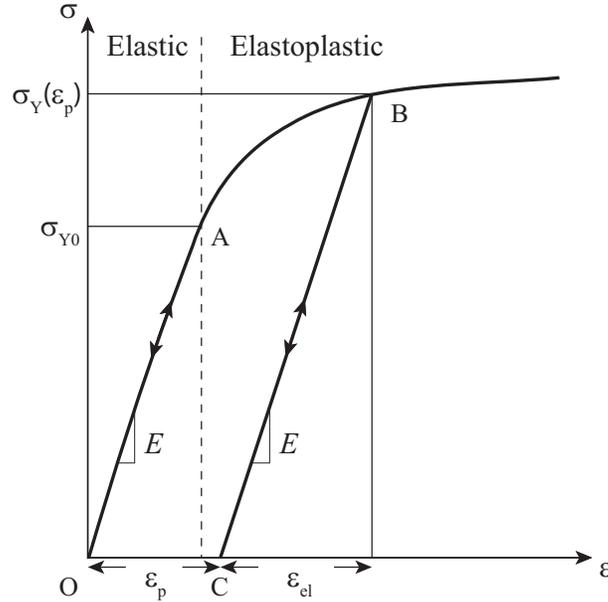


FIGURE 3.1: Courbe contrainte/déformation lors d'un essai de traction. Tant que la contrainte de traction appliquée au matériau reste inférieure à la limite élastique σ_{Y0} , le matériau adopte un comportement élastique. Ensuite, il se déforme plastiquement.

chargement suivra le chemin CB . On constate souvent que la limite élastique d'un matériau évolue en fonction de la déformation plastique subie par ce dernier ($\sigma_Y = \sigma_Y(\epsilon_p)$). La limite élastique dépend de l'histoire du chargement appliqué au matériau. Ce phénomène est appelé "écrouissage". Dans les prochaines sections, nous allons démontrer que nous pouvons retrouver de telles propriétés mécaniques macroscopiques avec le modèle développé précédemment.

3.2 Courbes de chargement

Comme discuté au chapitre 1, le système est piloté avec une dynamique extrême. La contrainte externe est fixée pour faire plastifier un site à la fois. Cette contrainte critique fluctue d'un événement plastique à un autre, d'un pas de temps à un autre. Nous pouvons voir sur la figure 3.2 les contraintes critiques consécutives au cours d'une simulation. Nous avons représenté l'évolution de $\sigma_c = \sigma_Y(k^*) - \sigma_{el}(k^*)$ pas de temps par pas de temps lors d'une simulation pour un système de taille $L = 64$.

Le choix d'une dynamique extrême, qui permet de rester au plus près de la transition entre régimes élastique et plastique, a évidemment une contrepartie, la perte de toute information sur la dynamique du système. Les "pas de temps" ici considérés ne caractérisent pas un temps "réel" mais permettent simplement de séparer les configurations successives du système. L'intérêt de la dynamique extrême est alors de donner accès à l'ensemble des configurations. Il est alors possible de reconstruire l'évolution du système sous différents types de chargement. Un pilotage quasi-statique en déformation permettra d'accéder à l'ensemble des configurations alors qu'un pilotage en contrainte verra le système sauter

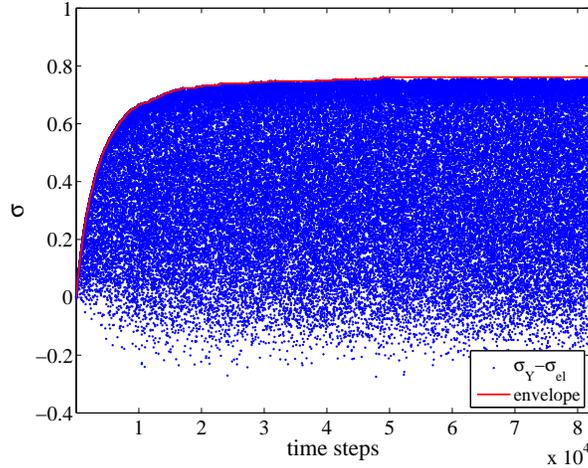


FIGURE 3.2: Les contraintes critiques et leur enveloppe au fur et à mesure des pas de temps pour un système de taille $L = 64$ et un incrément moyen de déformation locale de 0.05.

d'une configuration stable à la suivante. Comme illustré sur la figure 3.2, la courbe de chargement à contrainte croissante sera donc obtenue en prenant l'enveloppe du signal des contraintes critiques instantanées. Entre ces deux situations limites, une image plus réaliste d'un chargement expérimental pourra être obtenue *via* la prise en compte d'une raideur finie.

3.2.1 Passage en déformation

Au lieu du nombre de pas de temps en abscisse, nous faisons un changement de variable pour avoir la déformation macroscopique : $\varepsilon = \sum_k \varepsilon_t(k)/L^2$ où $\varepsilon_t(k)$ est la déformation cumulée au site k du début jusqu'au t ème pas de temps. Nous pouvons facilement, à l'aide de la figure 3.3(a), faire la correspondance entre l'enveloppe de ces contraintes critiques consécutives et la partie élastoplastique de la courbe de chargement expérimentale reproduite sur la figure 3.1. Notons que l'abscisse de la figure 3.3(a) ne représente que la déformation plastique alors que dans la figure 3.1 nous avons $\varepsilon_{el} + \varepsilon_p$. En regardant de plus près sous cette enveloppe sur la figure 3.3(b), nous voyons très clairement le caractère fluctuant des contraintes critiques.

Pour tester la pertinence de cette remise à l'échelle, il nous suffit d'observer l'influence de la taille du système sur le comportement macroscopique. Avec les mêmes paramètres mais pour des systèmes $L = 64, 128, 256$ (Fig. 3.4), le comportement macroscopique est inchangé. Le couple de variables contrainte-déformation nous permet donc bien de rendre compte de l'évolution de notre système.

De manière similaire à la courbe de chargement expérimentale, nous observons sur la courbe contrainte/déformation (Fig. 3.3(a)) un régime transitoire suivi d'un plateau. Du point de vue mécanique, le régime transitoire peut être associé à un phénomène d'écrouissage : la limite élastique dépend de l'historique du chargement et augmente sous l'effet de ce dernier. Par la suite, nous atteignons un plateau correspondant à un seuil d'écoulement macroscopique. Par la mise en évidence d'un seuil d'écoulement macroscopique et d'un

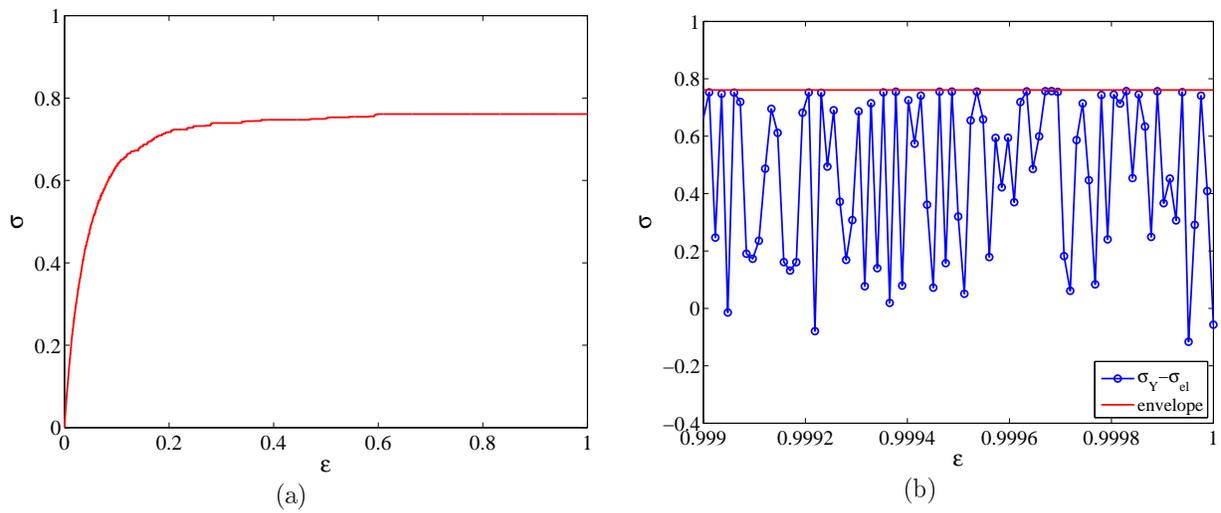


FIGURE 3.3: (a) La courbe enveloppe des contraintes critiques en fonction de la déformation macroscopique ; (b) La fluctuation des contraintes critiques sous l'enveloppe.

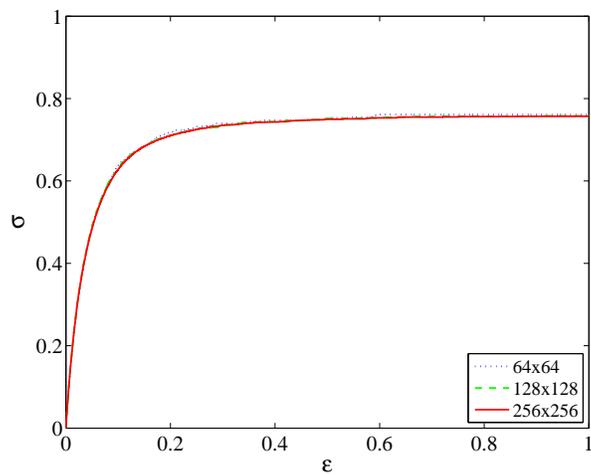


FIGURE 3.4: Courbes contrainte/déformation pour différentes tailles de système $L = 64, 128, 256$.

phénomène d'écrouissage, notre modèle statistique très simple permet donc de retrouver la phénoménologie classique du comportement plastique. L'évolution du seuil d'écoulement avec les paramètres du modèle et l'interprétation du phénomène d'écrouissage, généralement associé aux enchevêtrements des dislocations dans les matériaux cristallins, seront discutées dans les prochaines sections.

Si nous comparons à présent la courbe contrainte/déformation pour la fonction de *Green* en $-\cos 4\theta/r^2$ avec celle en champ moyen (Fig. 3.5), le comportement macroscopique est comparable. Nous avons ici aussi un régime transitoire et un régime stationnaire avec un niveau de plateau voisin. En première approximation, nous remarquons donc

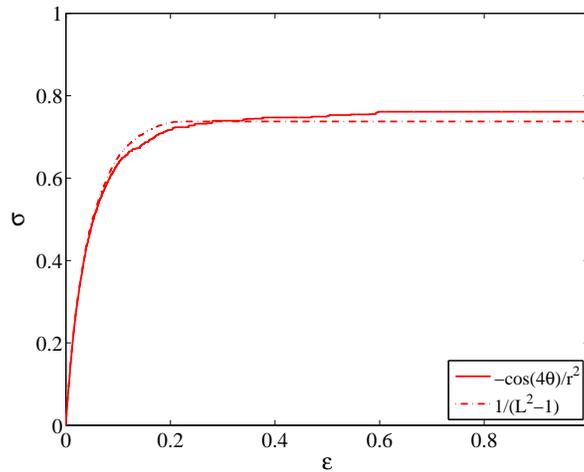


FIGURE 3.5: Courbes contrainte/déformation pour une fonction de *Green* en $-\cos 4\theta/r^2$ et celle en champ moyen : un comportement macroscopique similaire.

que le comportement macroscopique discuté ici semble peu sensible aux propriétés de la fonction de redistribution élastique.

3.2.2 Seuil d'écoulement

Dans le régime stationnaire, le niveau du plateau représentant la dernière limite élastique macroscopique dépend à la fois de l'incrément de déformation locale δ et des contraintes seuil σ_Y .

Nous illustrons ici la dépendance du seuil d'écoulement macroscopique aux deux paramètres du modèle, la distribution des contraintes seuil locales et celle des incréments de déformation locale. Notons que si la première variable correspond *a priori* simplement à la contrainte nécessaire à une réorganisation locale, l'interprétation microscopique de la seconde est plus délicate. En suivant l'image des "*shear transformation zones*", on peut la comprendre comme le produit de la déformation typique induite par une réorganisation locale par la densité des zones susceptibles de se réorganiser.

Rappelons qu'il a été décidé lors de la définition du modèle que l'incrément de déformation locale δ doit être choisi aléatoirement avec une distribution de probabilité uniforme entre 0 et δ_{max} . Si nous faisons varier l'amplitude des incréments de déformation locale δ_{max} , nous constatons sur la figure 3.6 que plus elle augmente et plus le niveau du plateau

baisse. En augmentant la moyenne de l'incrément de déformation locale, l'effet d'écroutissement est accentué et la limite élastique sature à une valeur plus faible.

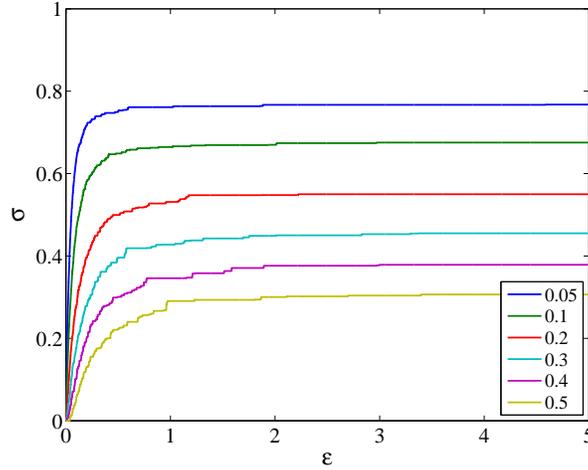


FIGURE 3.6: Courbes contrainte/déformation pour différents incréments moyens de déformation locale $\langle \delta \rangle = \delta_{max}/2 = 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ et pour un système de taille $L = 64$: le niveau du plateau change avec la moyenne de l'incrément de déformation locale.

Pour les contraintes seuil, leur distribution de probabilité influe aussi sur la valeur de cette dernière limite élastique. Afin de modéliser le caractère désordonné des matériaux amorphes, nous avons décidé que la contrainte seuil correspondant à la limite élastique locale en chaque site sera tirée au sort avec une distribution de probabilité uniforme : $\sigma_Y \in [0, 1]$, une moyenne $\mu = 0.5$ et un écart type $sd = 1/\sqrt{12}$. Nous pouvons aussi nous servir d'une distribution de probabilité gaussienne avec une fonction de densité :

$$f(\sigma_Y) = \frac{e^{-(\sigma_Y - \mu)^2 / (2sd^2)}}{sd\sqrt{2\pi}} \quad (3.2)$$

avec une moyenne μ et un écart type sd . Pour une même amplitude d'incrément de déformation δ_{max} , en comparant les courbes contrainte/déformation résultantes de l'utilisation d'une distribution uniforme ou gaussienne, nous pouvons noter sur la figure 3.7 que le comportement général et le niveau du plateau sont similaires quand les moyennes et les écarts types sont respectivement identiques. Par contre, ceci n'est plus vrai lorsque nous changeons la moyenne et/ou l'écart type. La courbe de chargement semble ainsi dépendre essentiellement des deux premiers moments de la distribution des contraintes seuil et rester peu sensible à sa forme particulière.

Il faut noter que la dépendance vis-à-vis de la moyenne est triviale car elle n'introduit qu'une simple translation, correspondant à un décalage de la contrainte d'écoulement macroscopique. Le seul paramètre important est l'écart type de la distribution utilisée.

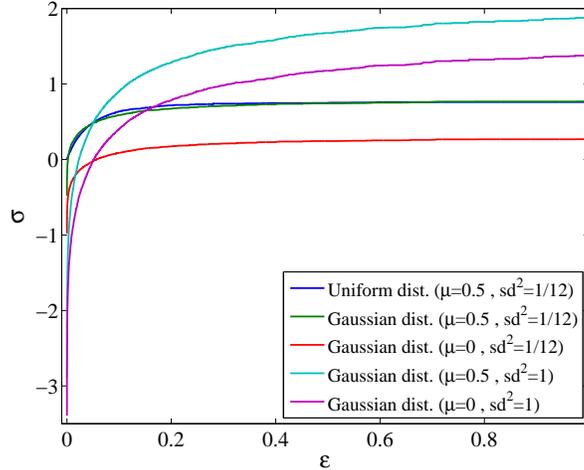


FIGURE 3.7: Courbes contrainte/déformation pour différentes distributions de probabilité des contraintes seuil, avec un incrément moyen de déformation $\langle \delta \rangle = \delta_{max}/2 = 0.1$ et un système de taille $L = 64$: le niveau du plateau change pour des moyennes et des écarts types respectivement différents.

3.3 Interprétation statistique de l'écroissage

Le phénomène d'écroissage est défini comme l'augmentation de la limite élastique sous l'effet de contraintes déformant le matériau plastiquement. Pour les matériaux cristallins, l'écroissage est interprété par l'enchevêtrement des dislocations et leur amoncellement autour des défauts. Pour le cas des matériaux amorphes, malgré l'absence de toute notion de dislocation, ce phénomène a déjà été observé expérimentalement [82] et par des modèles numériques. À l'aide du modèle de plasticité présenté dans ce travail, nous pouvons formuler une interprétation statistique de l'écroissage.

Comme cela a déjà été mentionné, chaque site k du système est caractérisé par une contrainte seuil $\sigma_Y(k)$. Au début de la simulation, cette contrainte seuil est choisie aléatoirement avec une distribution de probabilité uniforme : $\sigma_Y(k) \in [0, 1]$, une moyenne $\mu = 0.5$ et un écart type $sd = 1/\sqrt{12}$. Ce désordre nous permet de définir un critère local à une éventuelle réorganisation structurale d'un petit volume représenté ici par un site discret. Après chaque réorganisation, la structure locale change et la valeur de la contrainte seuil du site plastifié est renouvelée par une autre valeur aléatoire de la même distribution de probabilité.

Par le choix d'une dynamique extrémale pour déterminer le site qui sera déformé plastiquement à chaque pas de temps, nous introduisons un biais systématique dans l'évolution des distributions effectives des contraintes seuil. À chaque pas de temps, nous désignons le plus faible site k^* tel que $\sigma_c(k^*) = \min_k \{\sigma_Y(k) - \sigma_{el}(k)\}$ et ceci tend à éliminer préférentiellement les sites avec des contraintes seuil faibles et à les remplacer par des valeurs aléatoires "normales". Sur le graphique principal de la figure 3.8, nous pouvons observer les distributions effectives des contraintes seuil à différents niveaux de déformation macroscopique, autrement dit, après différents nombres de pas de temps, pour un système $L = 64$. La distribution initiale est bien conforme à la distribution de probabilité utilisée avec $\langle \sigma_Y \rangle \approx 0.50$ et $sd_{\sigma_Y} \approx 0.29$ à $t = 0$. En cumulant de la déformation macroscopique,

rique, les distributions effectives se décalent vers les grandes valeurs et convergent vers une distribution limite autour de la valeur maximale possible. Nous pouvons constater sur les deux graphiques à droite de la figure 3.8, représentant respectivement l'évolution de la moyenne et l'écart type des distributions effectives, que ces derniers tendent vers des valeurs stationnaires : $\langle \sigma_Y \rangle \approx 0.90$ et $sd_{\sigma_Y} \approx 0.07$.

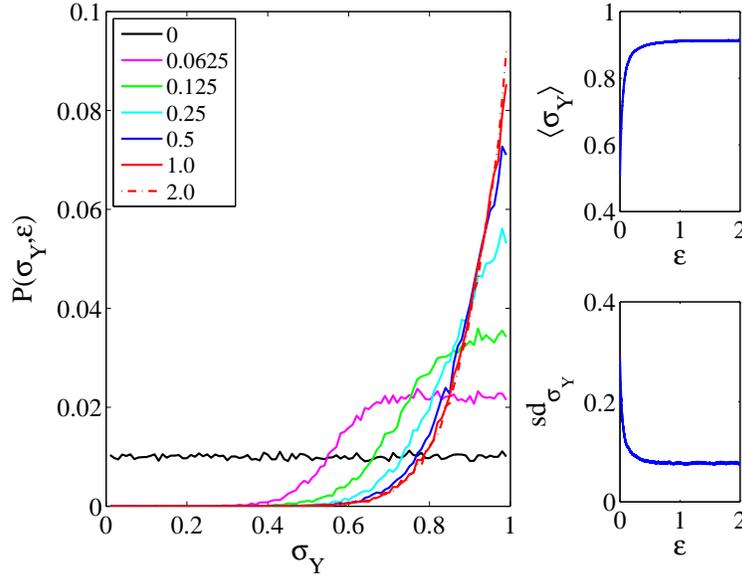


FIGURE 3.8: Les distributions effectives des contraintes seuil σ_Y à différents niveaux de déformation macroscopique, l'évolution de leur moyenne et de leur écart type pour un système de taille $L = 64$, cumulés sur 10 simulations distinctes : les distributions effectives se décalent vers les grandes valeurs et convergent vers une distribution limite.

La forme de la distribution limite dépend de la distribution de probabilité originale. En utilisant une distribution de probabilité gaussienne, les distributions effectives se décalent aussi vers des contraintes seuil élevées mais convergent vers une distribution limite autre que celle avec une distribution de probabilité uniforme (Fig. 3.9).

Comme exposé sur la figure 3.10(a), en partant d'une distribution de probabilité uniforme, les distributions des contraintes seuil au fil des incréments de déformation convergent vers une distribution limite ayant une forme comparable à celle d'une distribution de probabilité exponentielle. Quant aux contraintes seuil tirées au sort avec une distribution de probabilité gaussienne, leurs distributions convergent vers une distribution limite de forme gaussienne (Fig. 3.10(b)). Une des perspectives qui peut être retenue ici serait de mieux caractériser la distribution effective finale et de mieux comprendre la dépendance qu'elle a avec la distribution de probabilité utilisée initialement.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons pu montrer qu'avec le modèle statistique de plasticité développé pour ce travail de thèse nous pouvons retrouver un comportement macroscopique

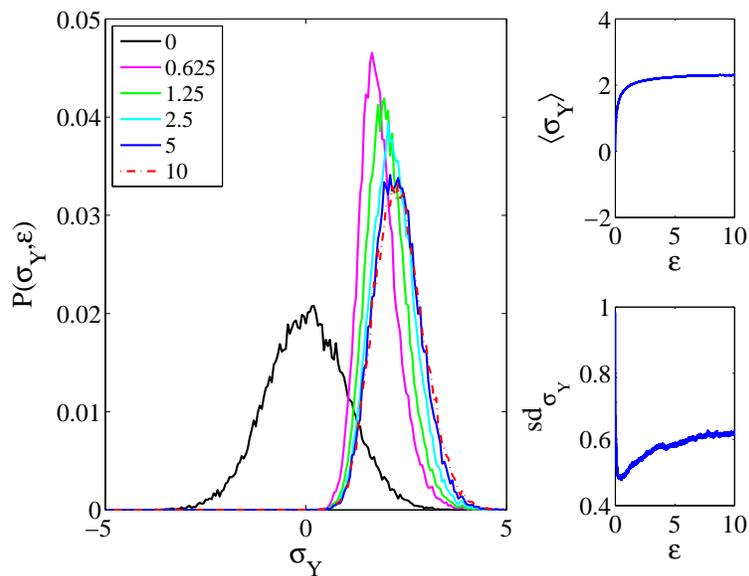


FIGURE 3.9: Les distributions effectives des contraintes seuil σ_Y à différents niveaux de déformation macroscopique, l'évolution de leur moyenne et de leur écart type pour un système de taille $L = 64$, cumulés sur 10 simulations distinctes et partant d'une distribution de probabilité gaussienne : la distribution effective finale dépend de la distribution de probabilité originale.

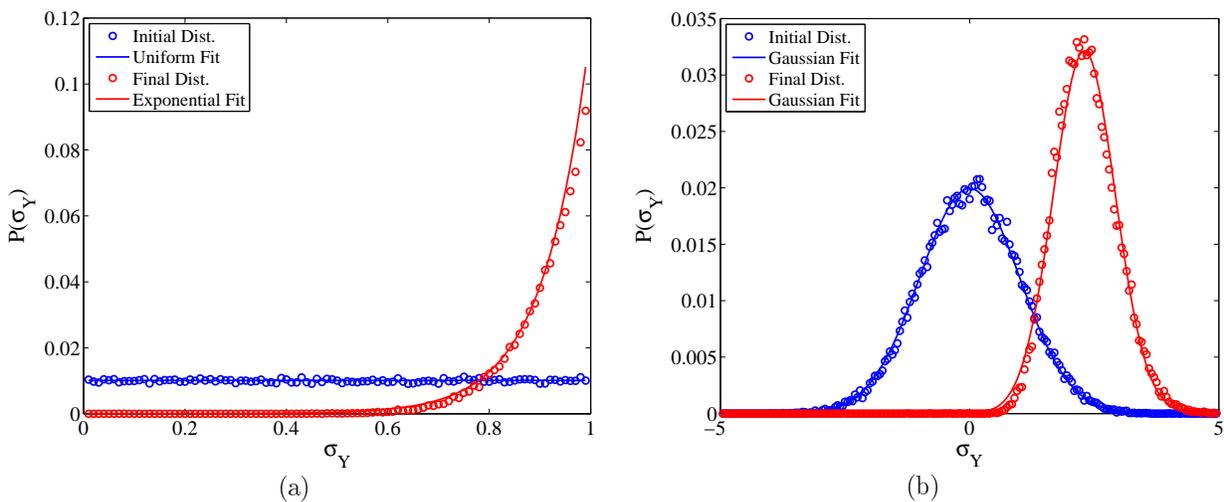


FIGURE 3.10: (a) Les contraintes seuil tirées au sort avec une distribution de probabilité uniforme : leur distribution limite est de forme exponentielle. (b) En revanche, avec une distribution de probabilité gaussienne : la distribution limite est aussi de forme gaussienne.

comparable à celui obtenu lors d'un test mécanique. Deux régimes distincts dominent ce comportement : un régime transitoire dû à un phénomène d'écrouissage et un régime stationnaire caractérisé par un seuil d'écoulement plastique. Une interprétation statistique a été formulée pour l'écrouissage *via* le biais systématique induit par le choix d'une dynamique extrême.

Chapitre 4

Localisation et diffusion des déformations plastiques locales

Dans ce chapitre, nous analyserons statistiquement les corrélations spatio-temporelles entre les événements plastiques successifs. Ceci nous permettra de mieux comprendre les interactions entre les réorganisations locales et nous essaierons de définir des comportements universels au voisinage de la transition pour ce genre de modèle de *pinning*.

4.1 Un simple régime diffusif ?

Une première approche de l'étude des déformations plastiques locales consiste à suivre l'évolution de leurs fluctuations au cours du chargement. Pour ce faire, nous pouvons par exemple suivre l'écart type de ce signal, correspondant à une "rugosité macroscopique" si l'on prend le point de vue d'une membrane élastique se mouvant dans un environnement désordonné. Nous définissons la rugosité macroscopique ρ comme l'écart type des déformations locales ε_i des différents sites $i = 1, 2, \dots, L^2$, formant le système :

$$\rho = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{L^2} \varepsilon_i^2 - (\sum_{i=1}^{L^2} \varepsilon_i)^2 / L^2}{L^2}} \quad (4.1)$$

Par comparaison, nous pouvons clairement dire à l'aide de la figure 4.1(a) que la rugosité du système, en fonction de la déformation macroscopique, a un profil différent de celui observé pour la courbe contrainte/déformation, un profil caractérisé par deux régimes distincts. La valeur de cette rugosité semble ainsi ne jamais saturer. Comme le montre la figure 4.1(b), l'évolution linéaire de l'écart type des déformations locales avec la racine carrée de la déformation macroscopique est en revanche compatible avec un simple processus diffusif. Ce résultat est *a priori* surprenant puisque le présent modèle inclut explicitement un terme d'interaction élastique anisotrope et les déformations ne devraient guère pouvoir être considérées comme indépendantes.

Sauf que, si nous déformons le système davantage, la rugosité sature. Sur la figure 4.2(a), nous avons représenté la rugosité ρ en fonction de la déformation macroscopique ε pour différentes tailles de système $L = 8, 16, 32, 64$. Au début de la déformation macro-

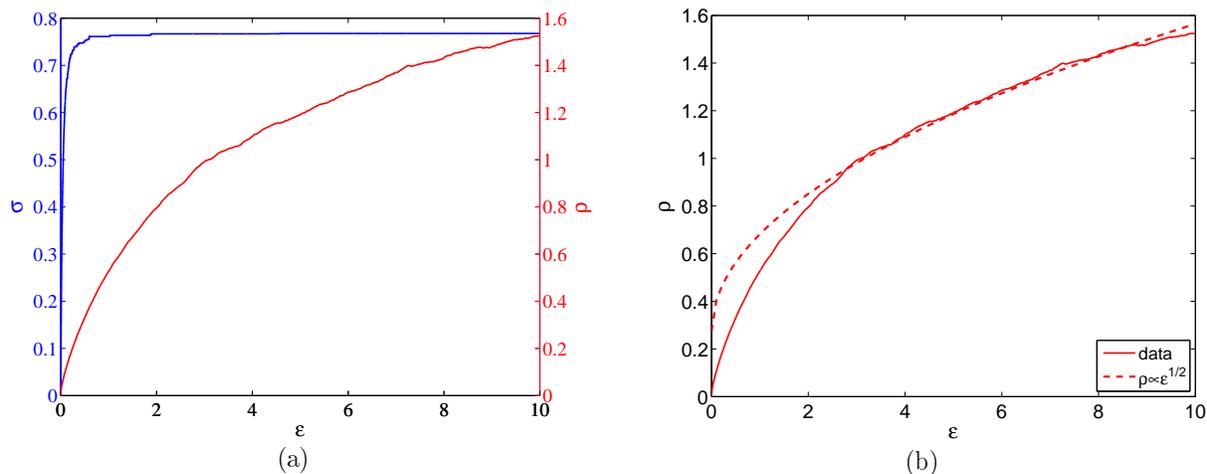


FIGURE 4.1: (a) L'évolution de la contrainte σ et de la rugosité macroscopique ρ en fonction de la déformation macroscopique ϵ , pour un système de taille $L = 64$: deux profils différents avec une rugosité macroscopique divergente. (b) Une évolution linéaire de la rugosité macroscopique ρ avec la racine carrée de la déformation macroscopique ϵ signant un simple processus diffusif.

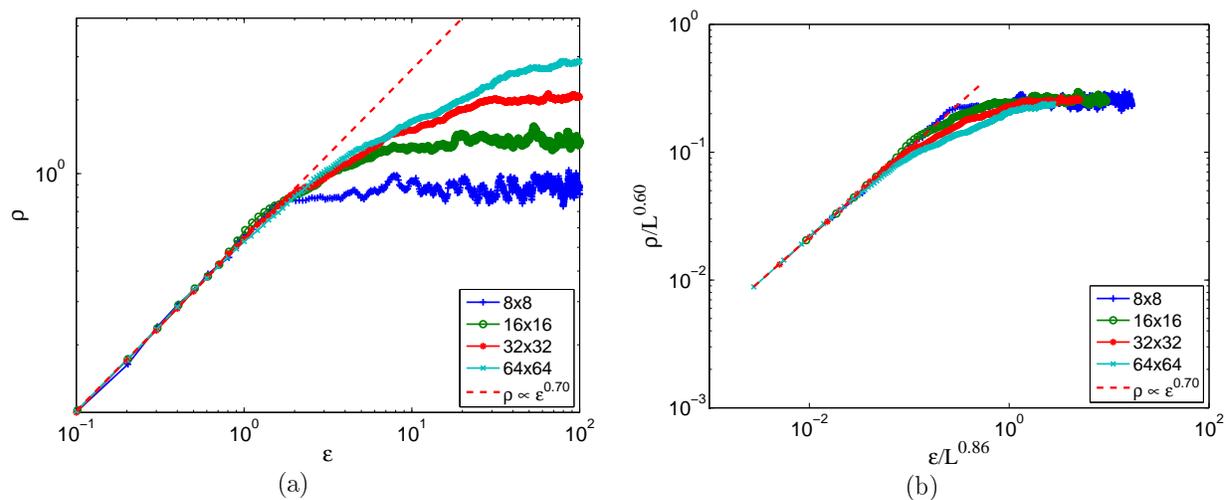


FIGURE 4.2: (a) L'évolution de la rugosité ρ en fonction de la déformation macroscopique ϵ , pour différentes tailles de système ($L = 8, 16, 32, 64$) : décrite par une loi de puissance $\rho \propto \epsilon^\alpha$, avec $\alpha \approx 0.70$, avant d'atteindre un plateau. (b) Idem que (a) avec une remise à l'échelle de la rugosité ρ par L^{-a} et de la déformation ϵ par $L^{-a/\alpha}$, avec $a \approx 0.60$.

scopique, la rugosité est décrite par une loi de puissance :

$$\rho \propto \varepsilon^\alpha \quad , \quad (4.2)$$

où $\alpha \approx 0.70$. Au-delà d'une certaine déformation macroscopique ε^* , la rugosité atteint un niveau de saturation qui semble être proportionnel à L^a avec $a \approx 0.60$ (Fig. 4.2(b)). Il est à noter que $\varepsilon^* \propto L^{a/\alpha}$. Pour aller plus loin, il est donc utile de s'intéresser de plus près à la distribution spatiale des déformations locales.

4.2 Interactions des événements plastiques corrélées le long du régime stationnaire

Nous commençons en reprenant une courbe de chargement (Fig. 4.3). Comme il a été développé au chapitre précédant, nous avons un régime transitoire, où la limite d'élasticité augmente avec le chargement, et un régime stationnaire, représentant la saturation de cette limite d'élasticité.

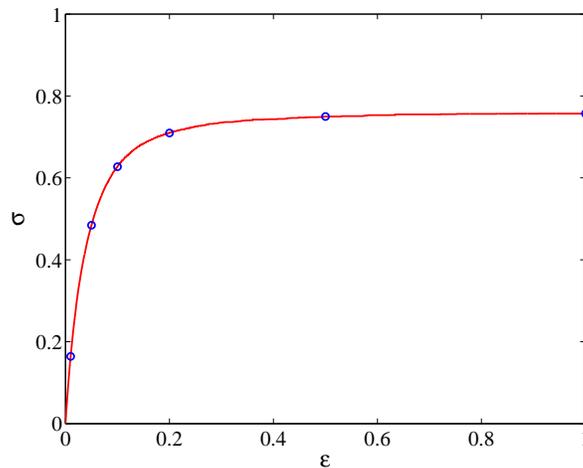


FIGURE 4.3: Courbe contrainte/déformation pour un système de taille $L = 256$ avec des niveaux ponctuels à $\varepsilon = 0.01, 0.05, 0.10, 0.20, 0.50, 1.00$.

Pour comprendre l'évolution des interactions entre les événements plastiques au fur et à mesure du chargement, nous étudions l'activité durant un certain nombre de pas de temps et à différents niveaux de déformation macroscopique. Pour ce faire, nous collectons sur une carte le nombre de fois qu'un site est plastifié, autrement dit, activé, durant un nombre de pas de temps donné, correspondant à un certain accroissement de déformation macroscopique. Sur la figure 4.4, pour un système de taille $L = 256$ et un incrément local de déformation maximale $\delta_{max} = 0.1$, nous avons des cartes représentant l'activité durant un nombre de pas de temps correspondant à une augmentation $\Delta\varepsilon = 0.01$ et ceci à différents niveaux de déformation macroscopique totale $\varepsilon = 0.01, 0.05, 0.10, 0.20, 0.50, 1.00$.

Au début du régime transitoire, nous constatons une distribution spatiale homogène de l'activité sur l'ensemble du système. En revanche, lorsque nous atteignons le régime

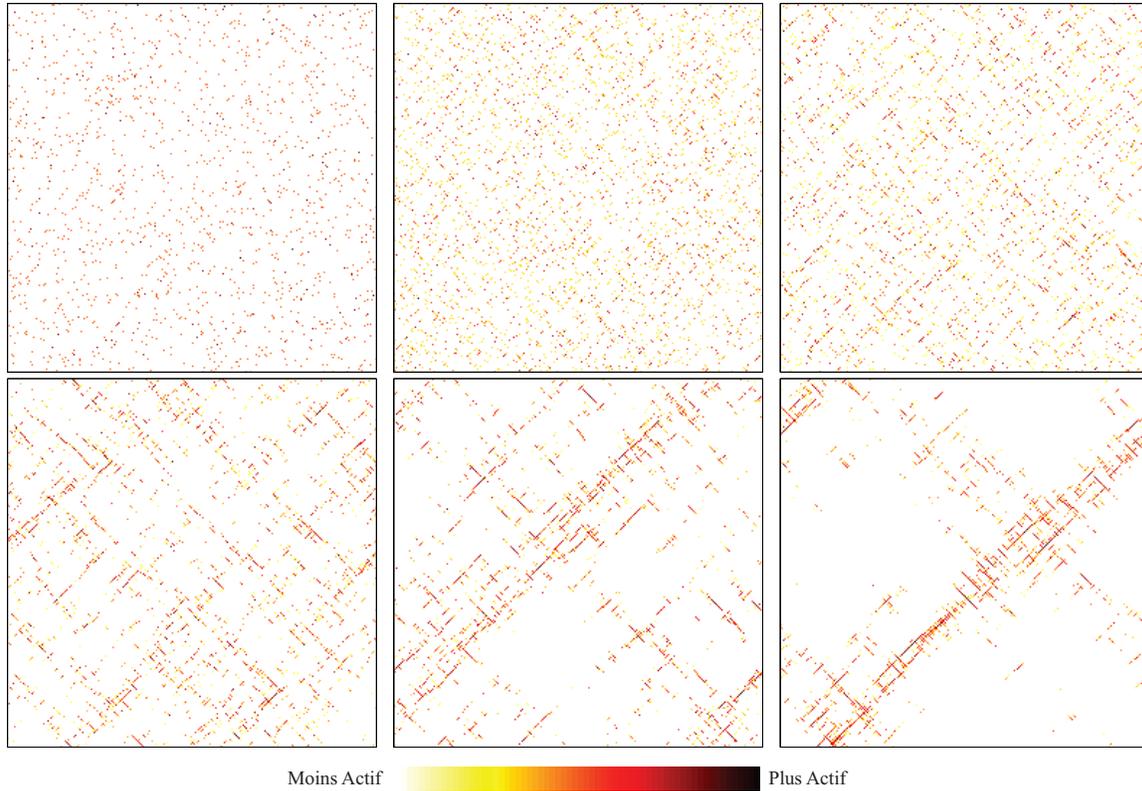


FIGURE 4.4: Cartes d'activité cumulée durant une fenêtre temporelle correspondant à une augmentation $\Delta\varepsilon = 0.01$ et ceci à différents niveaux de déformation macroscopique, respectivement, $\varepsilon = 0.01, 0.05, 0.10, 0.20, 0.50, 1.00$, pour un système de taille $L = 256$: l'activité se localise et forme des structures en $\pm 45^\circ$ lorsque la limite d'élasticité sature.

stationnaire, de fortes corrélations spatiales se développent : l'activité se localise et forme des structures orientées à $\pm 45^\circ$. Malgré ce caractère de localisation, ces structures ne sont pas persistantes dans le temps. Pour des fenêtres temporelles équivalentes au cours du régime stationnaire (Fig. 4.5), l'activité est localisée dans une fenêtre donnée mais ne l'est pas d'une fenêtre à l'autre.

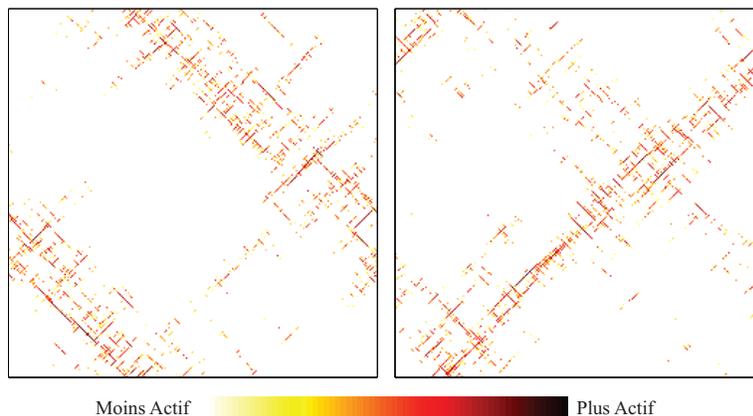


FIGURE 4.5: Cartes d'activité cumulée durant une fenêtre temporelle correspondant à une augmentation $\Delta\varepsilon = 0.01$ et ceci à différents niveaux de déformation macroscopique, respectivement, $\varepsilon = 0.95, 1.00$, pour un système $L = 256$: l'activité n'est pas persistante dans le temps.

Nous mettons donc en évidence un phénomène de localisation mais celui-ci est non-persistant. Le comportement de ce modèle semble donc marqué par une forte compétition entre localisation et diffusion. Dans la suite de ce chapitre, nous cherchons à caractériser la localisation de l'activité et son anisotropie dans le régime stationnaire.

4.3 Anisotropie des déformations plastiques locales

Comme nous l'avons soulevé auparavant, pour des échelles temporelles assez petites, la plasticité tend à se localiser sous format de motifs "unidimensionnels" à $\pm 45^\circ$. La distribution spatiale anisotrope de ces "bandes de cisaillement" résulte directement de la symétrie quadripolaire des interactions élastiques. Pour le cas des déformations plastiques de matériaux amorphes, de similaires corrélations spatiales de l'activité ont pu être observées lors de simulations atomiques. Par la minimisation de l'énergie potentielle d'un système amorphe bi-dimensionnel déformé par cisaillement, les travaux de *C.E. Maloney* et *A. Lemaître* [19, 20, 24] révèlent une localisation non persistante de la contrainte de cisaillement le long de segments parallèles à l'axe de déformation. Également, les travaux de *C.E. Maloney* et *M.O. Robbins* [27, 30], basés sur l'étude d'un verre *Lennard-Jones* bi-dimensionnel déformé en cisaillement, ont pu démontrer l'existence de corrélations spatiales dans le champ de déformation avec un fort caractère anisotrope à la limite quasi-statique (Fig. 4.6). Les tests mécaniques par simulation en modélisation moléculaire en deux dimensions de *Y. Shi* et *M. Falk* [22] montrent quant à eux une localisation de la déformation avec

des orientations à $\pm 45^\circ$. Des motifs similaires ont aussi été obtenus en trois dimensions dans le cas d'une compression [33] et d'une traction [86] uniaxiale.

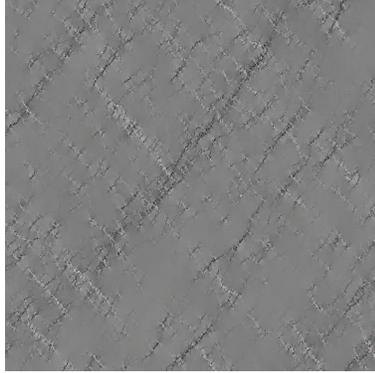


FIGURE 4.6: Le terme rotationnel du champ de déformation d'un verre *Lennard-Jones* bi-dimensionnel déformé en cisaillement. Avec une échelle linéaire grise allant du noir au blanc et après une restitution de la forme initiale du système (carré). (Reproduction issue d'un article de *C.E. Maloney* et *M.O. Robbins* [30])

Pour quantifier ce caractère anisotrope de la localisation, nous allons nous intéresser aux distributions spatiales des réorganisations plastiques consécutives. Nous définissons $\Delta x = |i_{t+1} - i_t|$ et $\Delta y = |j_{t+1} - j_t|$ comme les distances relatives entre deux événements successifs, respectivement, sur l'axe des x et des y . Sur la figure 4.7, nous avons la probabilité $P(\Delta x, \Delta y)$ que l'événement plastique n soit distant de Δx et Δy de l'événement $n - 1$ pour un système de taille $L = 256$ et un incrément local de déformation maximale $\delta_{max} = 1.0$. Cette figure met en évidence une localisation avec un angle préférentiel aigu autour de 45° .

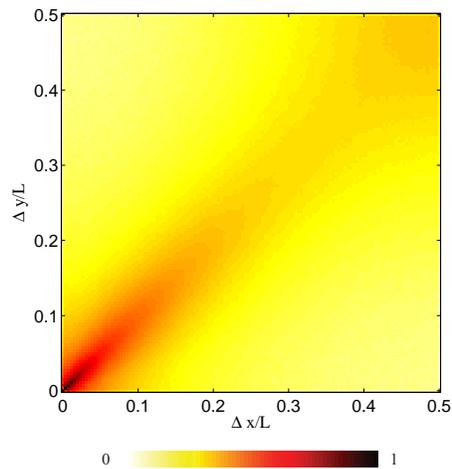


FIGURE 4.7: Probabilité de Δx et Δy , représentant les distances relatives entre deux événements plastiques successifs, pour un système de taille $L = 256$: un angle préférentiel autour de 45° .

La figure 4.8(a) présente la moyenne de Δy pour un Δx donné remis à l'échelle linéairement par la taille du système sur un graphique linéaire. Par l'interpolation linéaire

$\langle \Delta y \rangle \approx 1.06\Delta x + 0.82$, nous pouvons clairement dire qu'en moyenne le prochain événement plastique est situé sur un axe en 45° par rapport à l'axe des X .

Sur la figure 4.8(b), nous avons l'écart type de Δy en fonction de Δx , également remis à l'échelle linéairement par la taille du système, mais cette fois sur un graphique log-log. Nous pouvons formuler une relation telle que :

$$\sqrt{\langle \Delta y^2 \rangle} \propto \Delta x^\zeta \quad (4.3)$$

avec $\zeta \approx 0.66$. Le fait d'avoir un exposant inférieur à l'unité prouve le caractère anisotrope des motifs localisés, reflétant la symétrie quadripolaire des interactions élastiques. Le cas $\zeta \approx 1.0$ tend à localiser la prochaine réorganisation plastique dans un champ angulaire plus étendu. Notons que cette valeur numérique est très proche du résultat obtenu par *J.-C. Baret et coll.* [56] dans le cadre d'un modèle de plasticité amorphe en géométrie anti-plane.

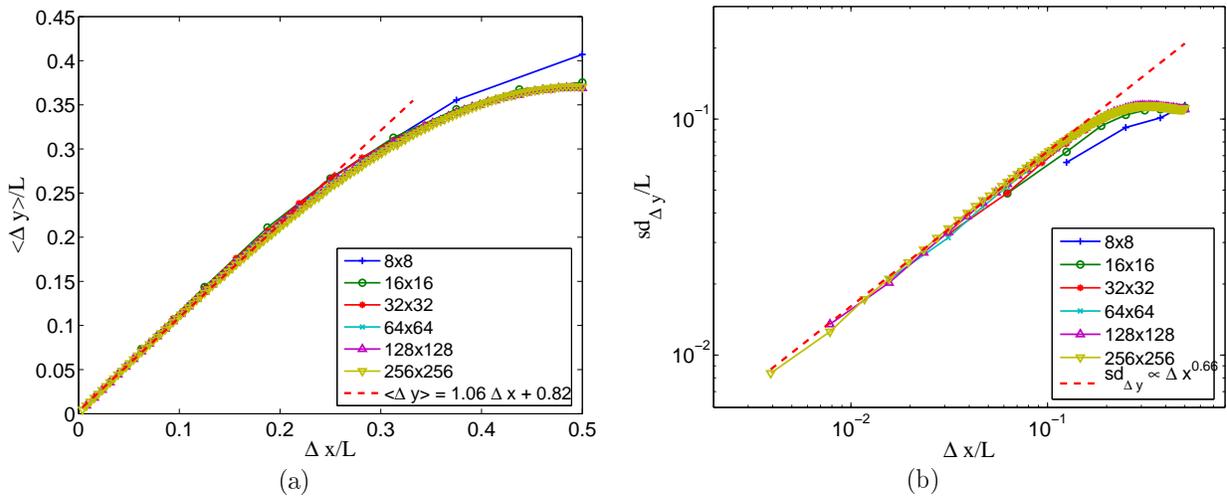


FIGURE 4.8: (a) La moyenne (graphique linéaire) et (b) l'écart type (graphique log-log) de Δy et en fonction de Δx entre deux événements consécutifs pour différentes tailles de système ($L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$) : l'anisotropie de l'activité quantifiée via la relation $sd_{\Delta y} \propto \Delta x^\zeta$ avec $\zeta \approx 0.66 < 1.0$.

De manière analogue aux travaux de *C.E. Maloney* et *M.O. Robbins* [30], nous pouvons également caractériser l'anisotropie de l'activité par l'analyse du spectre de puissance du champ de déformation plastique. Nous avons représenté sur la figure 4.9 la moyenne des spectres de puissance $S(\mathbf{q})$ de plusieurs cartes de déformation plastique locale prises pendant le régime stationnaire. Donc,

$$S(\mathbf{q}) = \langle |\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q})|^2 \rangle \quad , \quad (4.4)$$

avec $\tilde{\varepsilon}(\mathbf{q})$, la transformée de *Fourier* du champ de déformation, et \mathbf{q} , le vecteur d'onde (avec $q = \|\mathbf{q}\| = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ et $\theta = \arctan(q_y/q_x)$). Nous retrouvons la symétrie quadripolaire en $\pm 45^\circ$. Pour l'analyse, nous nous concentrons sur le premier quadrant du spectre de puissance en raison de cette symétrie.

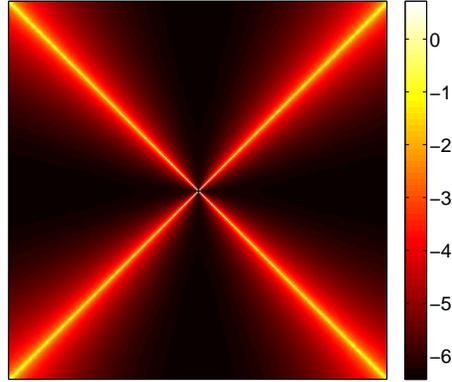


FIGURE 4.9: La moyenne des spectres de puissance $S(\mathbf{q})$ de plusieurs cartes de déformation plastique locale (avec une échelle logarithmique).

Premièrement, sur la figure 4.10(a), nous avons tracé S en fonction de la norme du vecteur d'onde q pour $\theta = 0, \pi/4$. Pour chaque angle θ , S décroît en loi de puissance $\alpha(\theta)$, telle que :

$$S(q)_\theta \propto q^{-\alpha(\theta)} \quad , \quad (4.5)$$

où $\alpha(\pi/4) \approx 1.17$ et $\alpha(0) \approx 0.27$. Deuxièmement, sur la figure 4.10(b), nous avons tracé S en fonction de l'angle θ pour $q = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128$. Nous pouvons ainsi remarquer que :

$$\log_{10} S(\theta)_q \propto 1 - |\cos(2\theta)|^\beta \quad , \quad (4.6)$$

où $\beta \approx 0.25$.

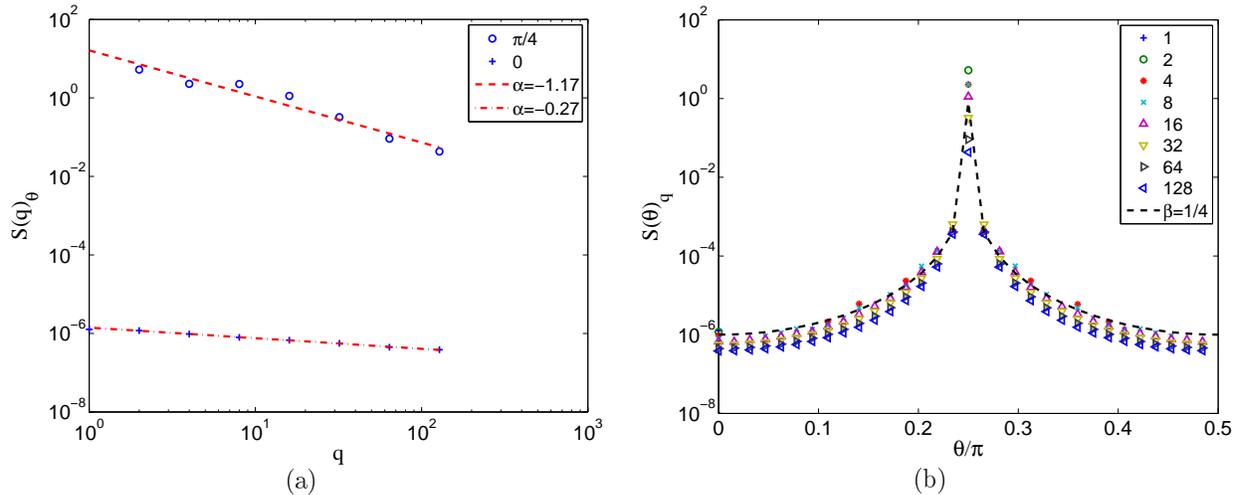


FIGURE 4.10: (a) Pour $\theta = 0, \pi/4$, S en fonction de la norme du vecteur d'onde q : $S(q)_\theta \propto q^{-\alpha(\theta)}$ avec $\alpha(0) \approx 0.27$ et $\alpha(\pi/4) \approx 1.17$. (b) Pour $q = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128$, S en fonction de l'angle θ : $\log_{10} S(\theta)_q \propto 1 - |\cos(2\theta)|^\beta$ avec $\beta \approx 0.25$.

Ceci nous permet de caractériser la moyenne des spectres de puissance $S(q, \theta)$ par

l'équation suivante :

$$\log_{10} S(q, \theta) = c_1 - [\alpha(\pi/4) + (\alpha(0) - \alpha(\pi/4)) |\cos(2\theta)|^\beta] [\log_{10}(q) + c_2] \quad , \quad (4.7)$$

où c_1 et c_2 sont des constantes d'ajustement. Ce résultat est bien sûr purement phénoménologique. Néanmoins, comme le montre la figure 4.11, présentant le tracé de l'équation 4.7 superposé aux données pour différentes valeurs de $q = 16, 32, 64, 128$, ce résultat reste correct.

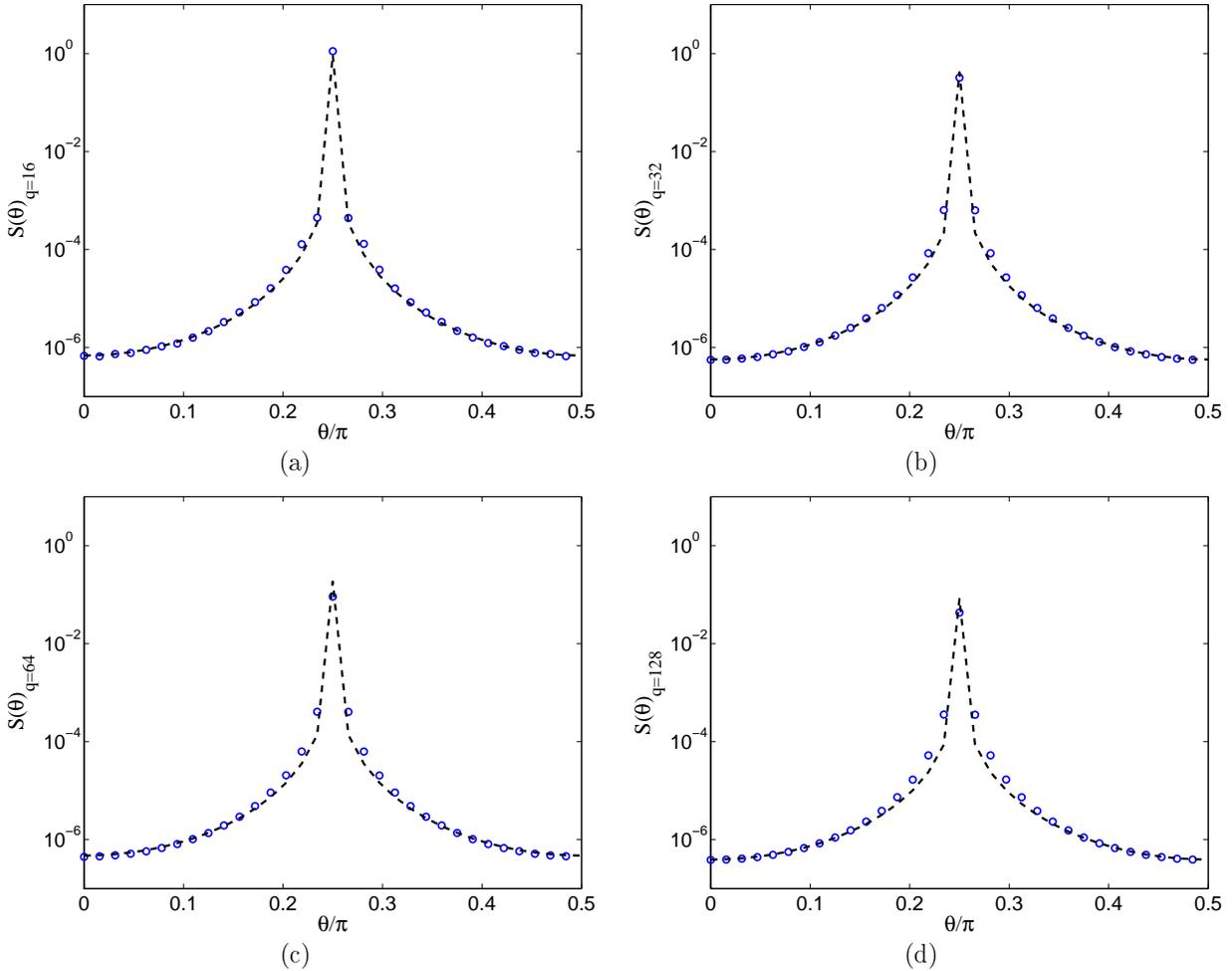


FIGURE 4.11: Le tracé de l'équation 4.7 superposé aux données de S en fonction de l'angle θ pour différentes valeurs de q : (a) $q = 16$, (b) $q = 32$, (c) $q = 64$, et (d) $q = 128$.

La même conclusion peut être faite si nous comparons la représentation du premier quadrant de S provenant des données (Fig. 4.12(a)) avec celui résultant de l'équation 4.7 (Fig. 4.12(b)).

Il faut rappeler que, par des simulations en dynamique moléculaire d'un verre *Lennard-Jones*, *C.E. Maloney* et *M.O. Robbins* [30] ont pu décrire S comme suit :

$$S(q, \theta) = S_0(\theta)q^{-\alpha(\theta)} \quad \text{avec} \quad \alpha(\theta) \approx 0.68 - 0.5 \cos(4\theta) \quad . \quad (4.8)$$

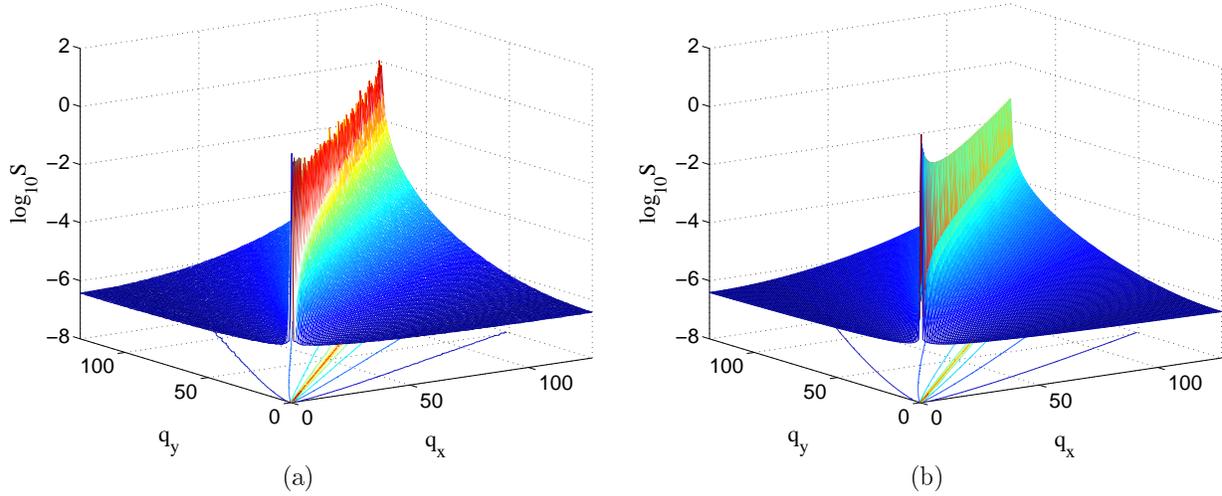


FIGURE 4.12: Représentation du 1er quadrant de S : (a) provenant des données et (b) résultant de l'équation 4.7.

4.4 Corrélation spatio-temporelle des déformations plastiques

En vue d'illustrer la localisation des déformations plastiques, nous étudierons au cours de cette section l'organisation spatio-temporelle de l'activité.

Nous commençons par présenter sur la figure 4.13(a) la distribution de probabilité $P(r)$ des distances relatives $r = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$ entre deux sites actifs à t et $t + 1$ pour différentes tailles de système et un incrément local de déformation maximale $\delta_{max} = 1.0$. Il est possible de superposer les différentes distributions (Fig. 4.13(b)) au moyen d'une remise à l'échelle par la taille du système : $r \rightarrow r/L$ et $P(r) \rightarrow P(r) * L^{1.51}$ puisque $P(r) \propto r^{-a}$ avec $a \approx 1.51$ pour $\Delta t = 1$.

La figure 4.14 propose l'illustration du développement de corrélation spatio-temporelle de la déformation plastique. Les différentes cartes successives illustrant l'activité cumulée sur des durées Δt croissantes mettent en évidence une échelle temporelle en dessous de laquelle les événements plastiques sont spatio-temporellement corrélés. Par conséquent, nous nous intéressons à l'étude de la distribution de probabilité $P(r, \Delta t)$ d'avoir une distance relative r entre deux sites actifs à t et $t + \Delta t$ pour une taille de système donnée (Fig. 4.15(a)). En adoptant les mêmes méthodes que celles utilisées dans les travaux de *A. Tanguy et coll.* [87] sur les interactions élastiques à longue portée sur un front de propagation, il est possible d'exprimer $P(r, \Delta t)$ sous une forme remise à l'échelle :

$$P(r, \Delta t) = \Delta t^{-1/z} \phi\left(\frac{r}{\Delta t^{1/z}}\right) \quad , \quad (4.9)$$

avec z , l'exposant dynamique permettant de décrire l'étalement de l'activité en fonction du temps sur une zone de taille $\xi \propto \Delta t^{1/z}$.

D'après les résultats exposés sur la figure 4.15(b), représentant la superposition des différentes distributions, l'exposant z est estimé à 1. De plus, la fonction de remise à

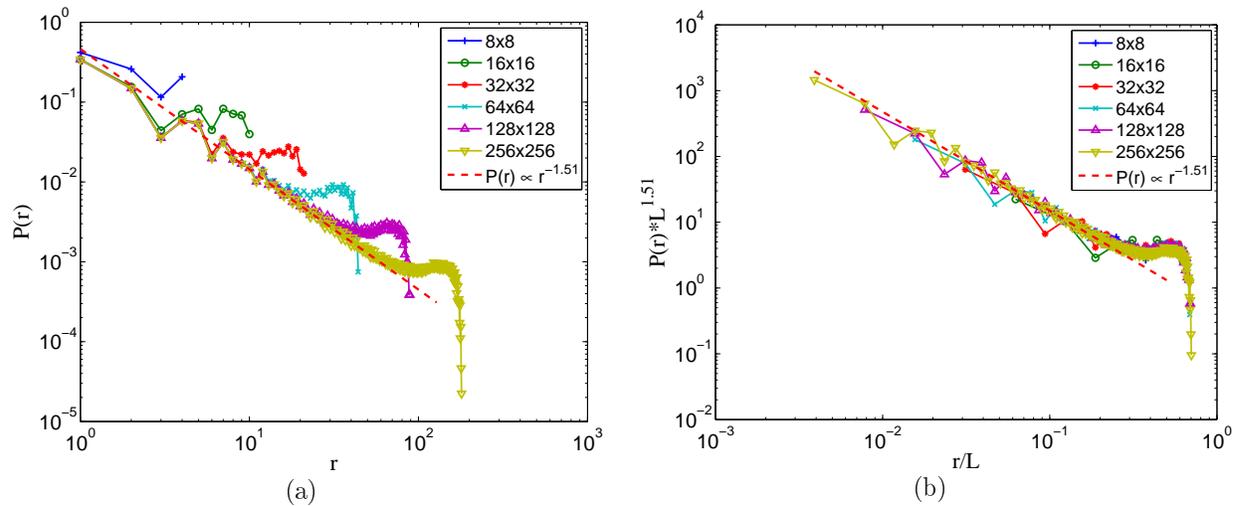


FIGURE 4.13: (a) Distributions de probabilité $P(r)$ des distances relatives r entre deux événements plastiques consécutifs pour différentes tailles de système ($L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$) : $P(r) \propto r^{-a}$ avec $a \approx 1.51$. (b) Superposition des différentes distributions *via* une remise à l'échelle par la taille du système.

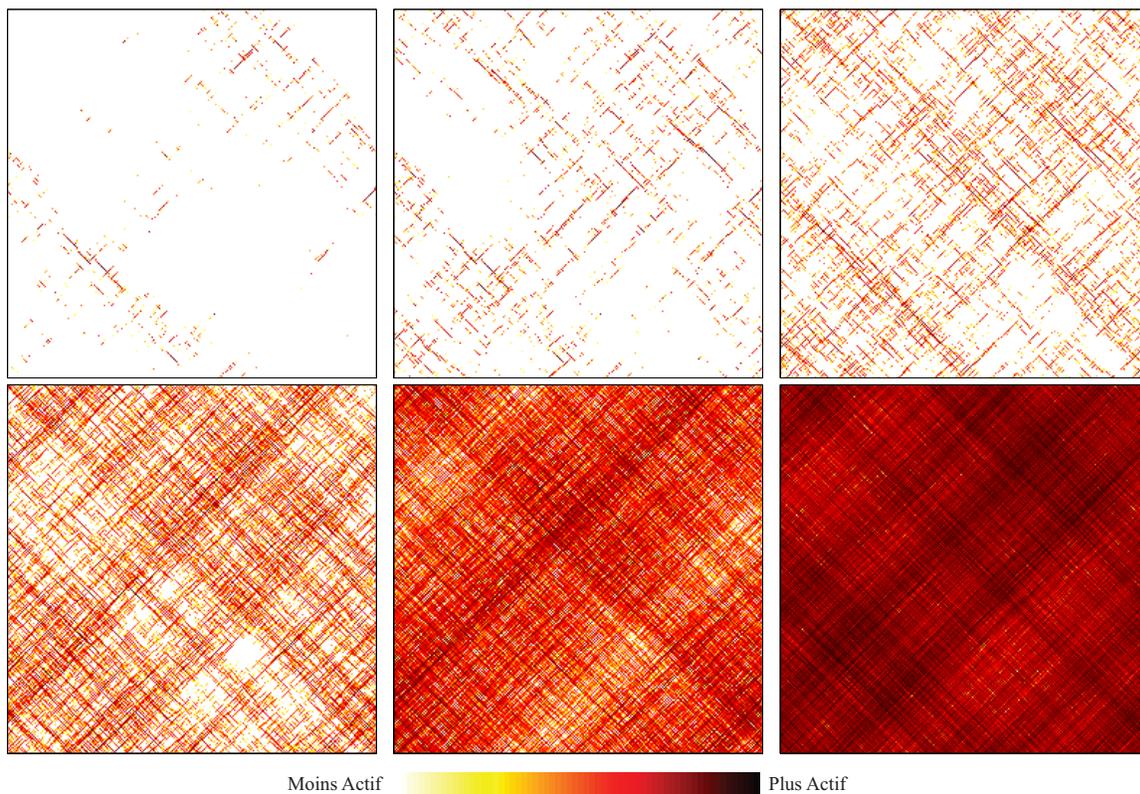


FIGURE 4.14: Cartes d'activité cumulée durant différentes tailles de fenêtre temporelle Δt correspondant, respectivement, à $\Delta \varepsilon = 2^{-8}, 2^{-6}, 2^{-4}, 2^{-2}, 2^0, 2^2$, pour un système de taille $L = 256$: l'activité est spatio-temporellement corrélée.

l'échelle $\phi(r/\Delta t^{1/z})$ possède des propriétés telles que :

$$\phi(x) \propto \begin{cases} x^{-a} & \text{pour } x \gg 1 \\ x^b & \text{pour } x \ll 1 \end{cases}, \quad (4.10)$$

avec $z = 1$, $a \approx 1.51$ pour le cas où les distances r sont plus grandes que la longueur de corrélation ξ et $b \approx 0.45$ pour le cas où elles sont plus petites.

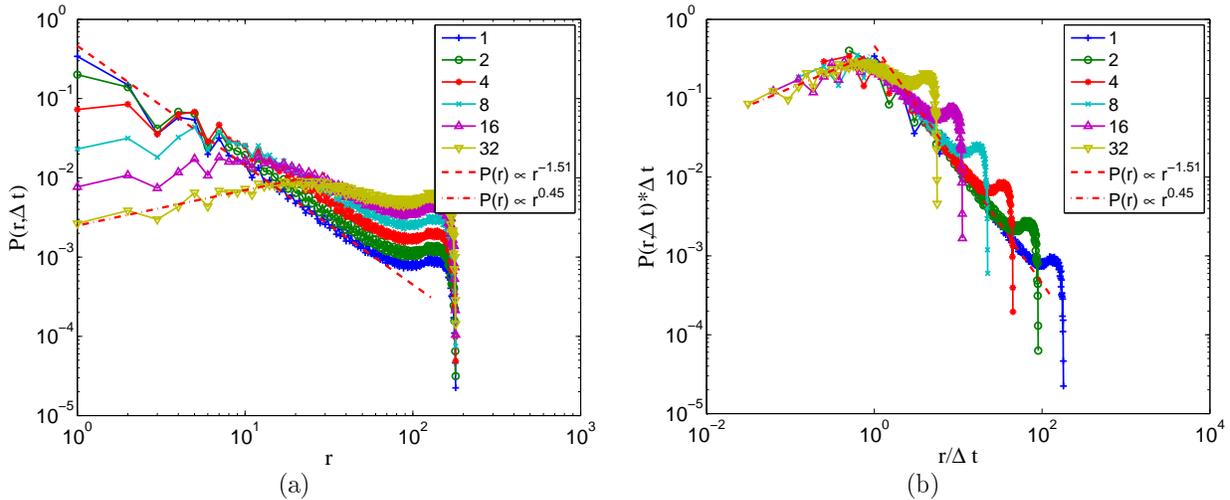


FIGURE 4.15: (a) Distributions de probabilité $P(r, \Delta t)$ des distances relatives r entre deux événements plastiques à t et $t + \Delta t$ avec $\Delta t = 1, 2, 4, 8, 16, 32$, pour un système de taille $L = 256$. (b) Superposition des différentes distributions : $P(r, \Delta t) = \Delta t^{-1/z} \phi(r/\Delta t^{1/z})$, avec $z = 1$.

Il est évident que les résultats présentés ci-dessus sont dominés par le caractère anisotrope de l'activité (Fig. 4.16). Pour mieux comprendre l'effet de ce caractère anisotrope sur la localisation, nous faisons une distinction entre les distances $r = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$ par l'orientation $\theta = \arctan(\Delta y/\Delta x)$ comme suit :

$$r \rightarrow r_+ \quad \text{pour } \pi/8 \leq \theta \leq 3\pi/8, \quad (4.11)$$

$$r \rightarrow r_- \quad \text{ailleurs}, \quad (4.12)$$

faisant la différenciation entre les contributions positives et négatives de la fonction de *Green*. Ceci nous permet de définir $P(r_+, \Delta t)$ et $P(r_-, \Delta t)$ les distributions de probabilité des distances r entre deux événements plastiques dans la direction donnant, respectivement, une augmentation ou une diminution de la contrainte élastique, autrement dit, avec un angle θ plus ou moins proche de $\pi/4$.

En accord avec les distributions superposées, dans le cas dominant r_+ (Fig. 4.17(a)), il s'avère que les résultats sont assez similaires à ceux présentés pour r avec $z_+ = 1$, $a_+ \approx 1.53$ et $b_+ \approx 0.35$. En revanche, dans le cas r_- (Fig. 4.17(b)), les résultats semblent être différents avec un nouvel exposant dynamique $z_- = 2$, $a_- \approx 1.34$ et $b_- \approx 0.76$. Nous observons l'existence de deux échelles de temps distinctes dans ce modèle. L'exposant dynamique $z_+ = 1$ est relié aux structures linéaires localisées et orientées en $\pm 45^\circ$ que nous pouvons observer sur la figure 4.14, tandis que $z_- = 2$ est un résultat analogue à une dynamique en champ moyen.

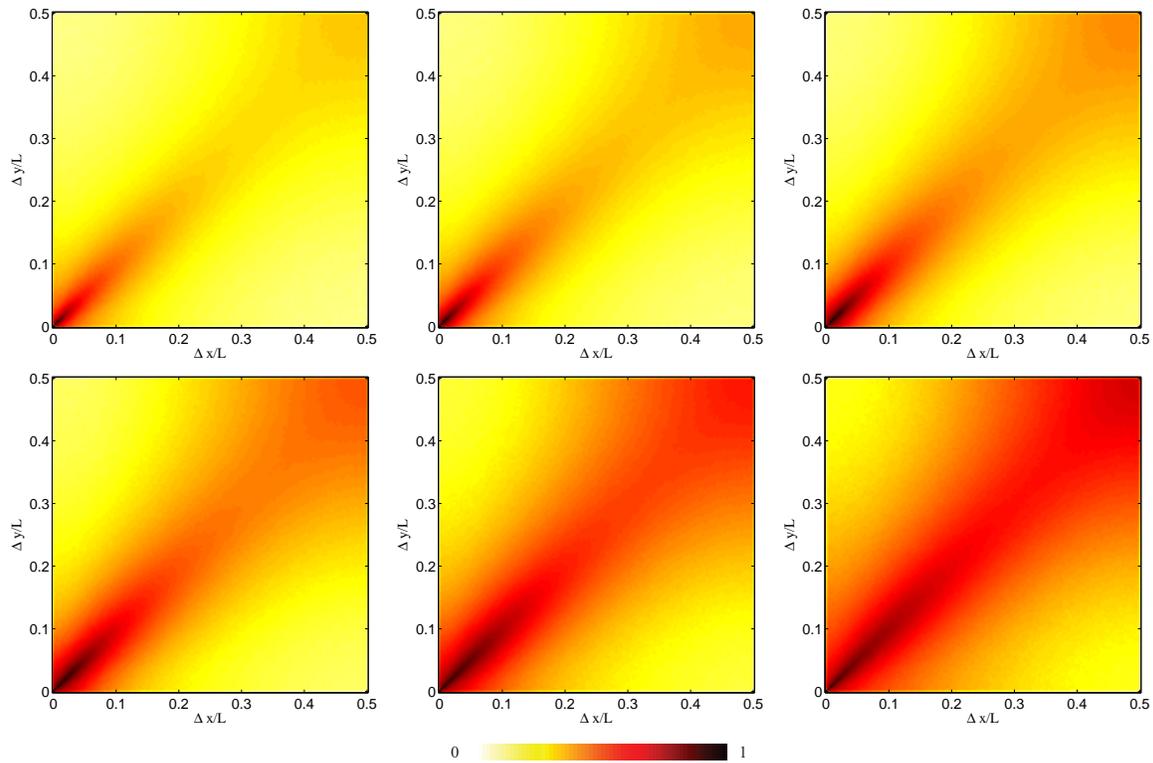


FIGURE 4.16: Probabilité de Δx et Δy , représentant les distances relatives entre deux événements plastiques à t et $t + \Delta t$ avec, respectivement, $\Delta t = 1, 2, 4, 8, 16, 32$, pour un système de taille $L = 256$.

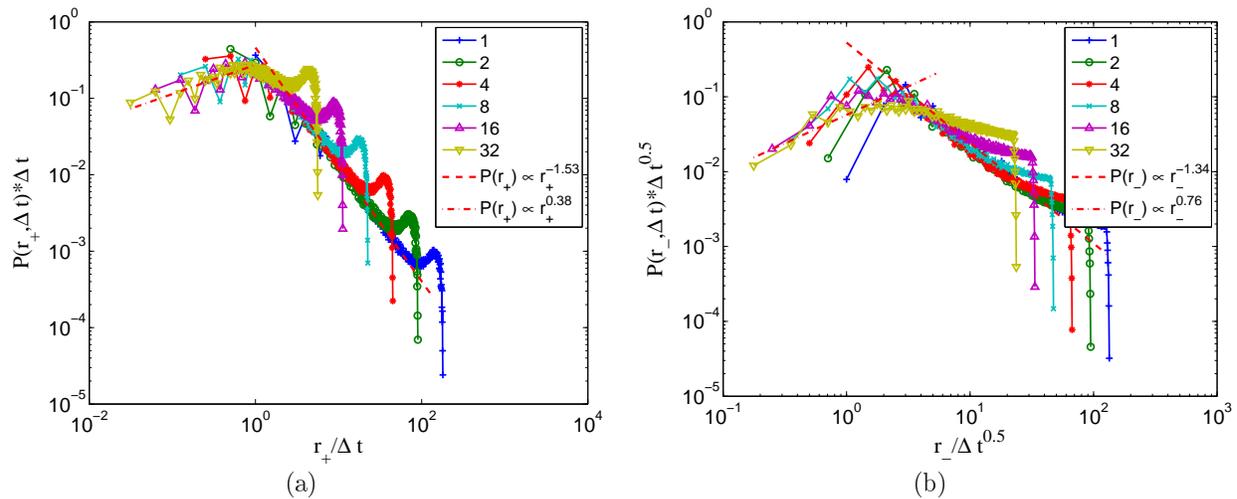


FIGURE 4.17: (a) Distributions de probabilité $P(r_+, \Delta t)$ superposées des distances entre deux événements plastiques à t et $t + \Delta t$ dans la direction donnant une augmentation de la contrainte élastique avec $\Delta t = 1, 2, 4, 8, 16, 32$, pour un système de taille $L = 256$: $z_+ = 1$. (a) Idem que (a) mais pour $P(r_-, \Delta t)$ dans la direction donnant une diminution de la contrainte : $z_- = 2$.

4.5 Temps de retour

Les deux différentes échelles de temps peuvent aussi être observées par l'étude de la distribution de probabilité $P(\Delta t_r)$ d'avoir Δt_r nombre de pas de temps nécessaire pour qu'un site donné soit actif à nouveau. Les distributions résultantes de simulation pour différentes tailles de système, présentées sur la figure 4.18, sont décrites par deux lois de puissance :

$$P(\Delta t_r) \propto \begin{cases} \Delta t_r^{-\tau_1} & \text{pour } \Delta t_r < T_1 \\ \Delta t_r^{-\tau_2} & \text{pour } \Delta t_r > T_1 \end{cases}, \quad (4.13)$$

avec $\tau_1 \approx 1.60$ et $\tau_2 \approx 0.56$.

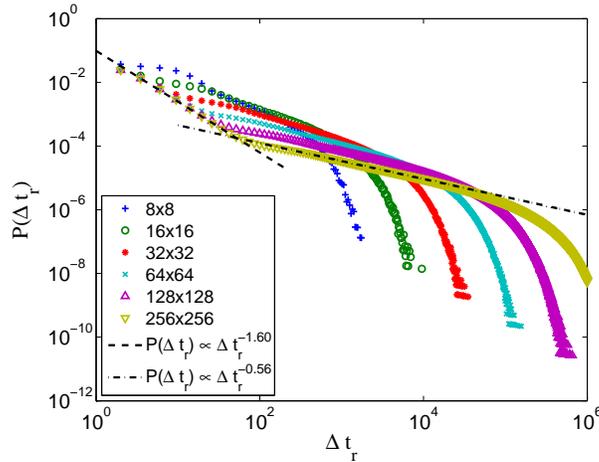


FIGURE 4.18: Distribution de probabilité $P(\Delta t_r)$ des temps de réactivation Δt_r d'un site donné, pour différentes tailles de système ($L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$) : Décrites par deux lois de puissance avec $\tau_1 \approx 1.60$ et $\tau_2 \approx 0.56$.

Après une remise à l'échelle par la taille du système L , les courbes superposées, présentées sur la figure 4.19(a), nous permettent de définir une relation telle que $T_1 \propto L$ ainsi qu'un exposant dynamique $z_1 = 1$ [87]. Par contre, les queues des différentes distributions sont remises à l'échelle avec L^2 : $T_2 \propto L^2$ et $z_2 = 2$ (Fig. 4.19(b)). Ce résultat est bien en accord avec les observations précédentes. La loi de puissance en τ_1 décrit l'activité à l'intérieur d'une zone de localisation limitée par la taille du système L . En revanche, la loi de puissance en τ_2 peut être attribuée à une dynamique de champ moyen.

Cependant, au regard de la figure 4.20, le comportement avec une redistribution élastique purement champ moyen est caractérisé par un $\tau_{MF} \approx 0$. Toutefois, la remise à l'échelle par L^2 est identique à celle utilisée pour le second comportement τ_2 . Par conséquent, ce dernier ne peut être imputé directement à une dynamique purement champ moyen.

4.6 Conclusion

Partant de l'hypothèse que la déformation plastique macroscopique est une succession d'événements plastiques, nous avons, lors de ce chapitre, étudié les corrélations spatio-

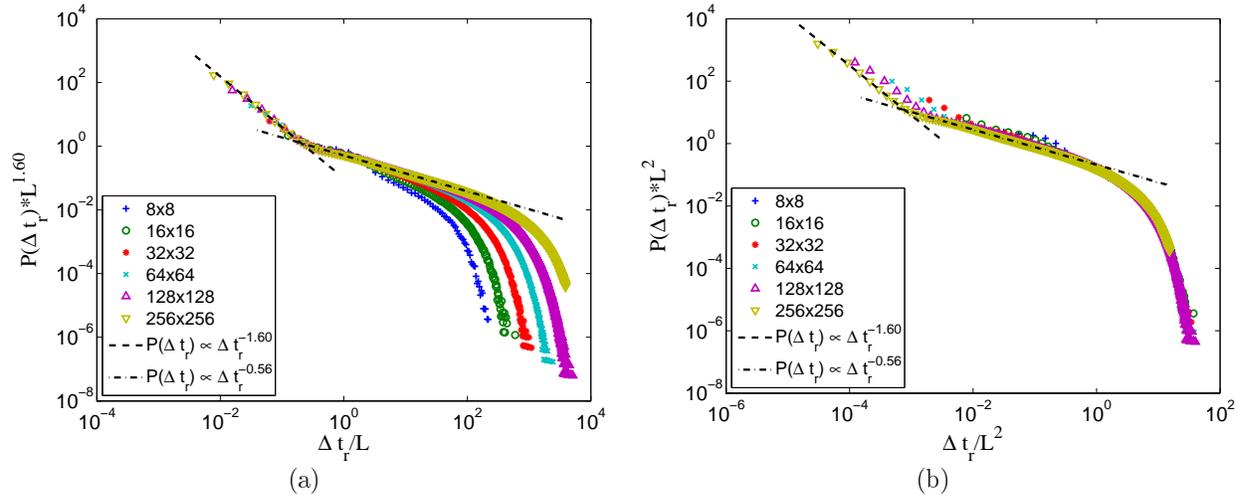


FIGURE 4.19: (a) Distribution de probabilité $P(\Delta t_r)$ des temps de réactivation Δt_r , remise à l'échelle par la taille du système L , d'un site donné : la loi de puissance en $\tau_1 \approx 1.60$ décrit l'activité à l'intérieur d'une zone de localisation. (b) Idem que (a) mais avec une remise à l'échelle par L^2 : la loi de puissance en $\tau_2 \approx 0.56$ peut être attribuée à une dynamique de champ moyen.

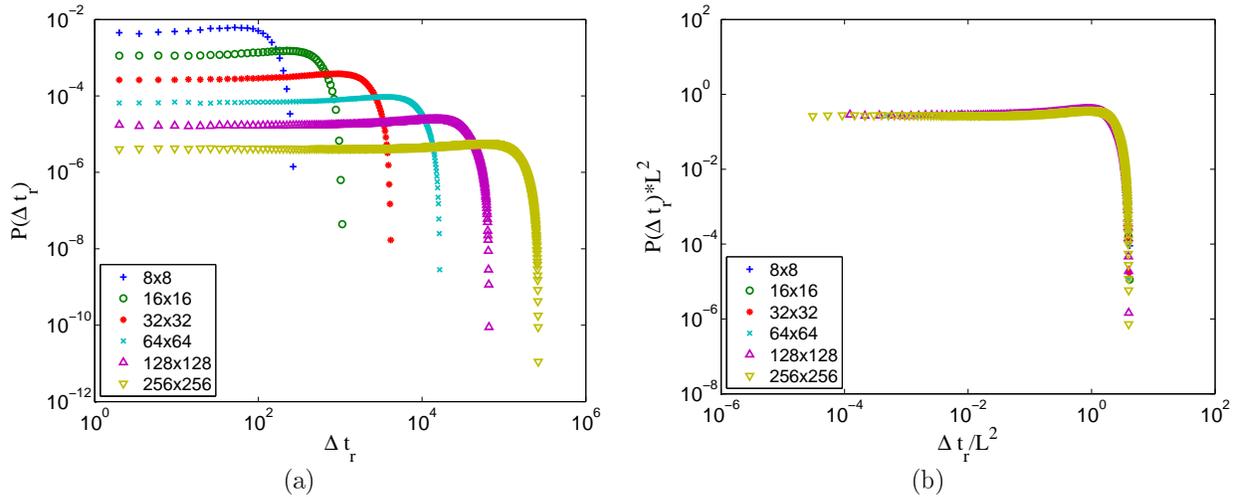


FIGURE 4.20: (a) Distribution de probabilité $P(\Delta t_r)$ des temps de réactivation Δt_r d'un site donné avec une redistribution élastique de type champ moyen, pour différentes tailles de système ($L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$). (b) Idem que (a) mais avec une remise à l'échelle par L^2 .

temporelles de ces événements. Si en première approche l'évolution de la déformation semble être de nature diffusive, il apparaît que les événements successifs sont fortement corrélés et loin d'être qu'une suite d'événements indépendants. En particulier, nous avons pu mettre en évidence un phénomène de localisation non-persistante selon les axes à $\pm 45^\circ$ de la fonction de redistribution élastique quadripolaire.

Nous avons clairement observé une anisotropie des positionnements relatifs des sites plastifiés et nous l'avons quantifiée par une loi de puissance avec un exposant $\zeta \approx 0.66 < 1.0$ décrivant l'écart type de Δy pour un Δx donné *via* une relation telle que : $sd_{\Delta y} \propto \Delta x^\zeta$. Cette anisotropie de la déformation plastique a aussi été caractérisée avec une loi d'échelle par l'analyse du spectre de puissance du champ de déformation. De plus, nous avons constaté une localisation des événements plastiques à l'intérieur d'une zone donnée et durant un certain nombre de pas de temps. L'étude de cette localisation nous a permis de mettre en évidence la coexistence de deux exposants dynamiques $z_+ = 1$ et $z_- = 2$, découlant du caractère anisotropique de la dynamique du modèle lui-même. Ces deux exposants dynamiques ont aussi été observés lors de l'analyse des temps de retour.

Chapitre 5

Analyse des avalanches d'événements plastiques

Jusqu'ici, nous avons étudié les événements plastiques individuellement et le développement de leurs corrélations spatio-temporelles. Il est temps à présent d'analyser la dynamique collective. Pour ce faire, nous allons définir, sous le vocable d'avalanche, un ensemble d'événements plastiques faisant partie d'une même dynamique collective. Ceci nous permettra de déterminer les distributions de taille de ces avalanches et de caractériser la dynamique à l'intérieur d'une avalanche.

Pour les résultats exposés dans ce chapitre, nous rappelons que les seuils locaux de plasticité sont tirés au sort avec une distribution uniforme $\sigma_Y \in [0, 1]$, de même que les incréments locaux de déformation plastique $\delta \in [0, 1]$.

5.1 Définition d'une avalanche pour décrire le phénomène de cascade

Dans le cas des modèles de *pinning* en régime quasi-statique, la dynamique des avalanches peut être reliée aux fluctuations de la force externe f_{ext} qui contrôle le système [87, 88]. Tant que cette force externe appliquée f_{ext} est supérieure à un seuil critique f_c , le système est dans un état d'écoulement plastique. Dès que la force externe f_{ext} chute sous le niveau du seuil critique f_c , après une déformation de taille finie, le système finit par se bloquer et atteint un état de piégeage.

La figure 5.1 montre la contrainte extrême σ_c instantanée durant un certain nombre de pas de temps. Pour définir une avalanche de manière similaire à [87], nous considérons une raideur k très petite mais différente de zéro. Comme illustré sur la figure 5.1, les segments tracés en gras ayant une pente de $-k$ représentent les contraintes externes qui contrôlent le système. À mesure que la déformation plastique augmente, la contrainte externe décroît linéairement d'une quantité $k\Delta t$, où Δt est égal au nombre d'itération. Ainsi, dès lors que la contrainte externe σ_{ext} chute sous le niveau de la contrainte extrême σ_c , elle devient égale à cette dernière. Les événements plastiques durant lesquels la contrainte externe reste supérieure à la force critique définissent l'avalanche. La taille $S_{\Delta t}$ de cette avalanche correspond à une quantité de déformation externe contrôlant le processus. Une

définition similaire a été utilisée par *M. Zaiser et coll.* [62, 89] pour l'identification des avalanches dans le cas des modèles de dislocation pour les matériaux cristallins.

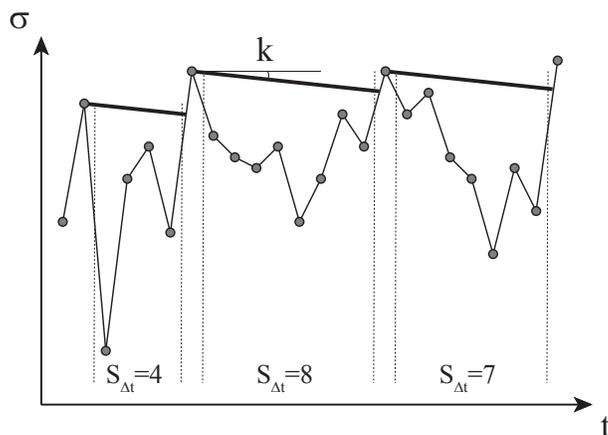


FIGURE 5.1: Représentation schématique de la contrainte extrême σ_c en fonction du temps. Avec une pente $-k$, un segment en gras correspond à la contrainte externe et permet de définir une avalanche de taille $S_{\Delta t}$.

5.2 Distribution des tailles d'avalanche

Partant de la définition exposée précédemment, la figure 5.2 représente la distribution des tailles d'avalanche $P(S_{\Delta t})$ pour un système de taille $L = 256$ et une raideur $k = 10^{-5}$. La distribution des tailles d'avalanche respecte une loi de puissance telle que $P(S_{\Delta t}) \propto S_{\Delta t}^\alpha$ où $\alpha \approx -1.19$, valide en dessous d'une taille de coupure $S_{\Delta t}^*$.

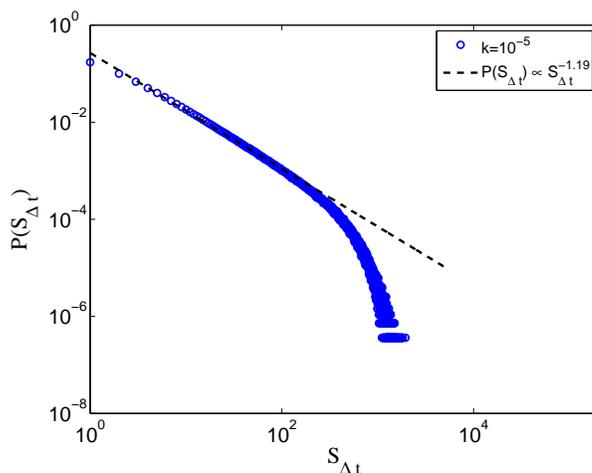


FIGURE 5.2: Distribution des tailles d'avalanche $S_{\Delta t}$ pour un système de taille $L = 256$ et une raideur $k = 10^{-5}$; en dessous d'une coupure $S_{\Delta t}^*$, la distribution est décrite par une loi de puissance $P(S_{\Delta t}) \propto S_{\Delta t}^{-1.19}$.

Par les résultats exposés sur la figure 5.3, il est bien évident que la forme de la distribution change si nous faisons varier la taille du système L ou la raideur k . Pour la même taille de système $L = 256$, lorsque la raideur k diminue et tend vers 0, les distributions correspondantes respectent toujours une loi de puissance avec $\alpha \approx -1.19$ mais les tailles de coupure se décalent vers de plus grandes valeurs (Fig. 5.3(a)). Nous avons un effet similaire dans le cas d'une diminution de la taille du système L pour une même raideur $k = 10^{-5}$ (Fig. 5.3(b)).

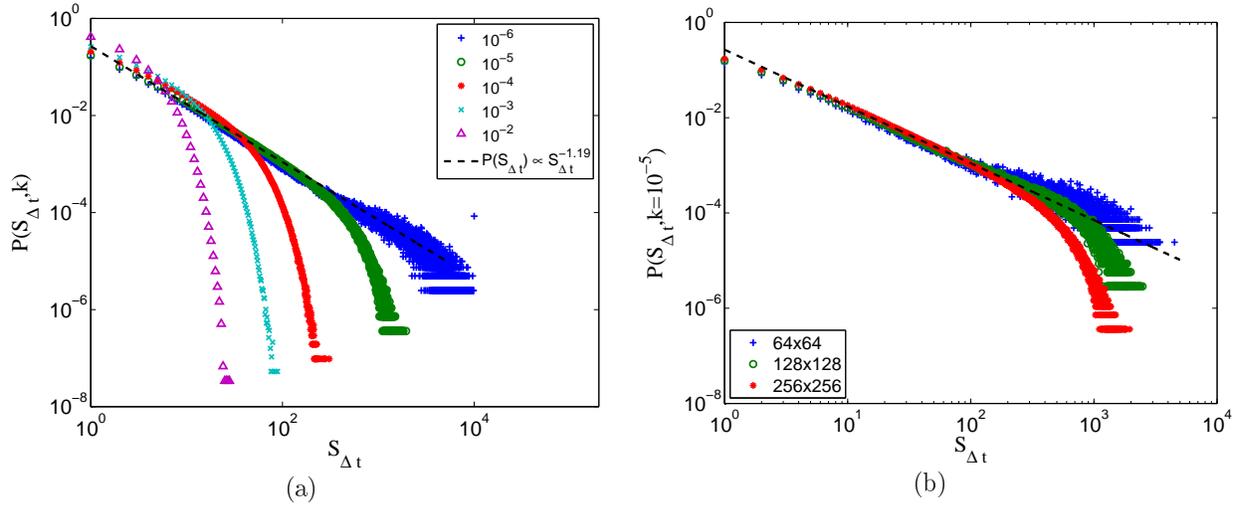


FIGURE 5.3: (a) Distributions des tailles d'avalanche $S_{\Delta t}$ pour un système de taille $L = 256$ et différentes valeurs de raideur $k = 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}$: tout en respectant une loi de puissance avec $\alpha \approx -1.19$, les tailles de coupure augmentent lorsque la raideur tend vers 0. (b) Pour une raideur $k = 10^{-5}$ et différentes tailles de système $L = 64, 128, 256$, idem que (a) sauf qu'ici les tailles de coupure augmentent lorsque la taille du système diminue.

5.3 Taille de coupure des avalanches

Afin de mieux caractériser les distributions des tailles d'avalanche, il est nécessaire de déterminer leurs tailles de coupure en fonction de la raideur et de la taille du système. De manière similaire aux travaux de *M. Zaiser et coll.* [62, 89], ces distributions possèdent une loi de puissance de forme :

$$P(S_{\Delta t}) \propto S_{\Delta t}^{-1.2} f(S_{\Delta t}/S_{\Delta t}^*) \quad , \quad (5.1)$$

où $S_{\Delta t}^*$ est la taille de coupure, une taille caractéristique d'avalanche, et f peut être approximée par :

$$f(S_{\Delta t}/S_{\Delta t}^*) \approx \exp\left(-\left(S_{\Delta t}/S_{\Delta t}^*\right)^2\right) \quad . \quad (5.2)$$

L'ajustement des paramètres de l'équation 5.1 aux différentes distributions nous permet de déterminer la taille de coupure $S_{\Delta t}^*$ en fonction de la raideur k et de la taille du système L .

Pour un système de taille $L = 256$ et différentes valeurs de raideur, les distributions des tailles d'avalanche et les courbes ajustées correspondantes sont présentées sur la figure 5.4. Après la compilation de tous les résultats, nous représentons sur la figure 5.5(a) la

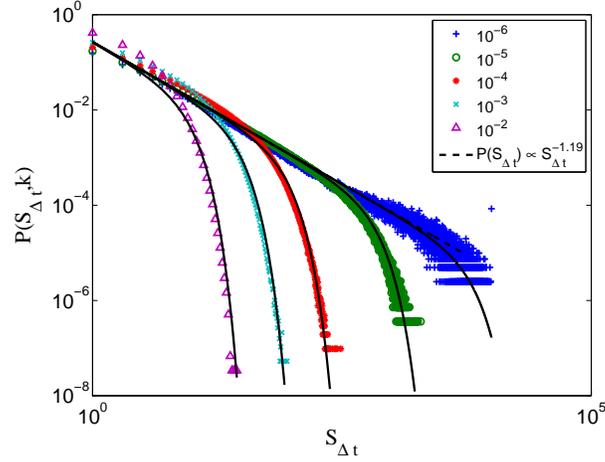


FIGURE 5.4: Distributions des tailles d'avalanche $S_{\Delta t}$ ainsi que leurs courbes ajustées pour un système de taille $L = 256$ et différentes valeurs de raideur $k = 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}$.

taille de coupure $S_{\Delta t}^*$ en fonction de la raideur k pour chaque taille de système L . Nous pouvons clairement observer l'existence de deux lois de puissance distinctes. En fonction de la raideur k et pour un système de taille donnée, nous avons :

$$S_{\Delta t}^* \propto \begin{cases} k^{-v_1} & \text{pour } k < k^* \\ k^{-v_2} & \text{pour } k > k^* \end{cases}, \quad (5.3)$$

où $v_1 \approx 1.01$, $v_2 \approx 0.49$. En accord avec la remise à l'échelle présentée sur la figure 5.5(b), nous pouvons réécrire l'équation 5.3 pour différentes tailles de système comme suit :

$$S_{\Delta t}^* \propto \begin{cases} 1/kL & \text{pour } k < k^* \\ 1/\sqrt{k} & \text{pour } k > k^* \end{cases}, \quad (5.4)$$

où nous avons choisi de faire les approximations $v_1 = 1$, $v_2 = 1/2$ et où la raideur critique k^* est fonction de la taille du système L : $k^* \sim L^{-2}$.

Ceci nous permet de superposer, par des mises à l'échelle appropriées, les distributions des tailles d'avalanche pour les deux régimes distincts (Fig. 5.6).

Pour aller plus loin dans l'interprétation, il convient d'abord de remarquer que, pour s'affranchir des effets de taille dans l'étude du comportement mécanique du système, nous avons proposé au chapitre 3 d'opérer le changement de variable $\varepsilon = t/L^2$ où t est le nombre d'itérations. Ce changement de variable permet d'obtenir une courbe maîtresse contrainte/déformation indépendante de la taille du système. Cette remarque incite à poser pour la raideur $k = E/L^2$ où E est un module élastique véritablement indépendant du système. Avec ce changement de variable, les deux régimes précédemment discutés

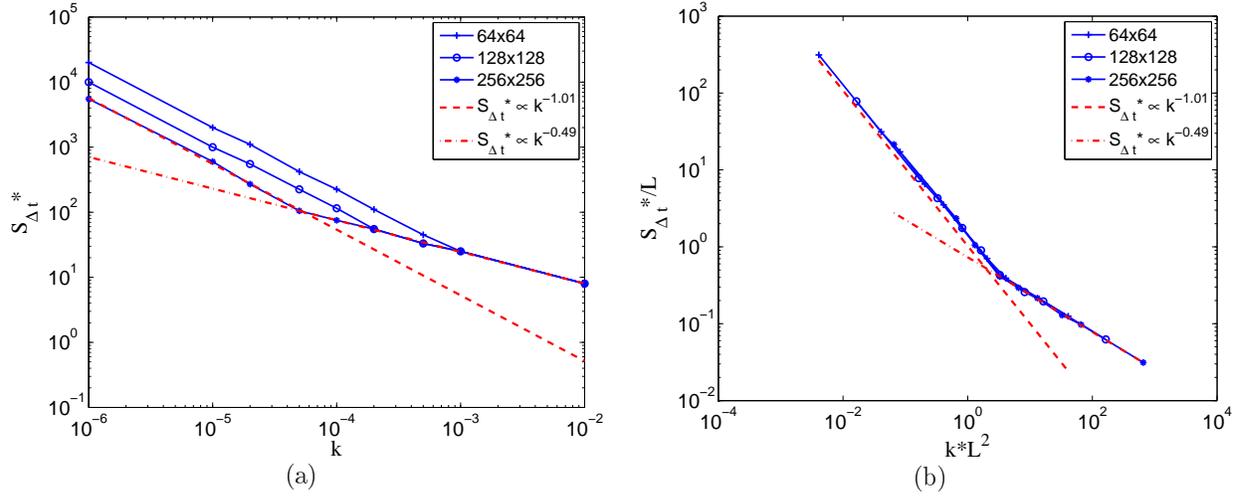


FIGURE 5.5: (a) Taille de coupure $S_{\Delta t}^*$ en fonction de la raideur k pour différentes tailles de système $L = 64, 128, 256$; décrite par deux lois de puissance : $v_1 \approx 1.01$ et $v_2 \approx 0.49$. (b) Idem que (a) mais avec une remise à l'échelle.

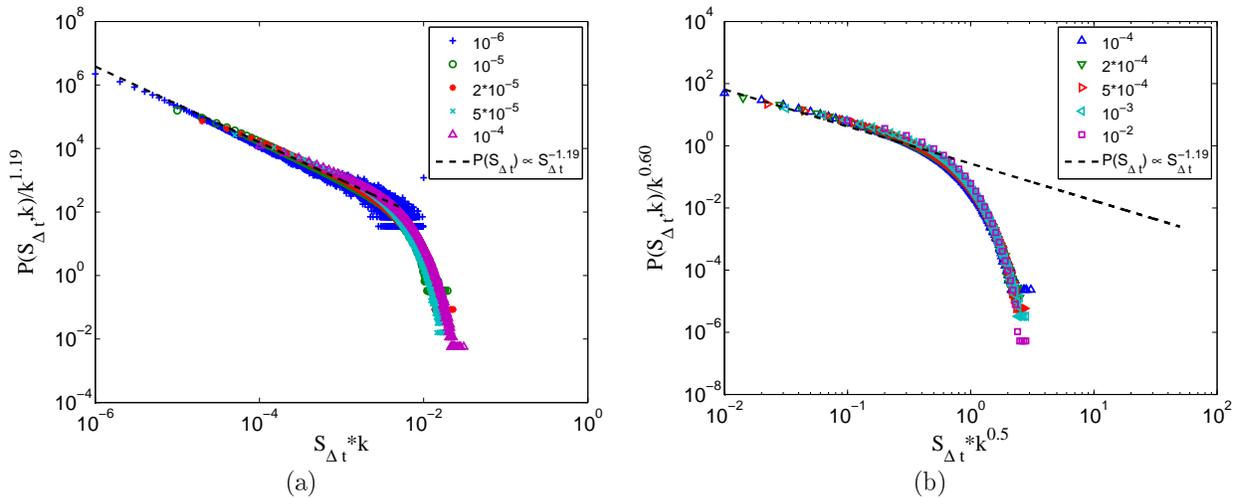


FIGURE 5.6: Superposition des distributions des tailles d'avalanche $S_{\Delta t}$ avec un système de taille $L = 256$ et pour le régime : (a) $k < k^*$, (b) $k > k^*$.

pour la taille de coupure se réécrivent maintenant :

$$S_{\Delta t}^* \propto \begin{cases} L/E & \text{pour } E < E^* \\ L/\sqrt{E} & \text{pour } E > E^* \end{cases}, \quad (5.5)$$

où le module critique est maintenant $E^* = 1$. La taille typique d'une avalanche peut alors être évaluée par :

$$\langle S_{\Delta t} \rangle \approx \frac{\int_1^{S^*} s^{1-\alpha} ds}{\int_1^{S^*} s^{-\alpha} ds}, \quad (5.6)$$

$$\approx \frac{1 - \alpha [s^{2-\alpha}]_1^{L/E^v}}{2 - \alpha [s^{1-\alpha}]_1^{L/E^v}}, \quad (5.7)$$

où $\alpha \approx 1.2$, $v = 1$ ou $v = 1/2$ selon que $E < 1$ ou $E > 1$. Étant donné que α est compris entre 1 et 2, l'intégrale du numérateur est dominée par sa borne supérieure alors que celle du dénominateur est dominée par sa borne inférieure. Nous obtenons donc pour la taille typique des avalanches :

$$\langle S_{\Delta t} \rangle \approx \frac{\alpha - 1}{2 - \alpha} \frac{(L/E^v)^{2-\alpha} - 1}{1 - (L/E^v)^{1-\alpha}}. \quad (5.8)$$

La figure 5.7 illustre la moyenne de la taille des avalanches $\langle S_{\Delta t} \rangle$ en fonction de la taille du système L pour différentes valeurs de module élastique $E \leq 1$ (ainsi, $v = 1$). Nous pouvons clairement voir que les interpolations effectuées sur les données (lignes pointillées) sont similaires aux tracés de l'équation 5.8 (lignes pleines). Pour des systèmes

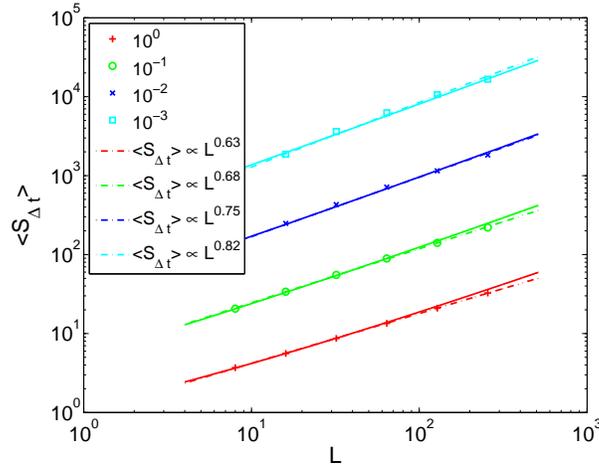


FIGURE 5.7: La moyenne de la taille des avalanches $\langle S_{\Delta t} \rangle$ en fonction de la taille du système L pour différentes valeurs de module élastique $E = 1, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$ avec, en lignes pointillées, les interpolations des données et, en lignes pleines, les tracés du résultat analytique 5.8.

de grande taille ($L \gg 1$) et avec des petits modules élastiques ($E \ll 1$), nous avons par simplification de l'équation 5.8 :

$$\langle S_{\Delta t} \rangle \propto (L/E)^\beta \quad \text{où} \quad \beta = 2 - \alpha \approx 0.8. \quad (5.9)$$

Notons que, même mesuré sur deux décades sur la figure 5.7, l'exposant apparent reste très dépendant du module élastique.

Ce résultat doit être comparé à ceux de *C.E. Maloney* et *A. Lemaître* [19] qui obtiennent $\langle S_{\Delta t} \rangle \propto L$ par des simulations de déformation quasi-statique sur des amorphes 2D de type *Lennard-Jones* ainsi qu'à ceux de *A. Lemaître* et *C. Caroli* [59] qui obtiennent $\langle S_{\Delta t} \rangle \propto L$ ou $L^{0.3}$ avec un modèle champ moyen en fonction de la distribution choisie pour un bruit effectif supposé rendre compte des interactions élastiques.

5.4 Caractérisation des structures formées lors d'une avalanche

Après avoir caractérisé les distributions des tailles d'avalanche en fonction de la raideur k et de la taille du système L (autrement dit, en fonction du module élastique $E = kL^2$), nous allons lors de cette section décrire et analyser les structures formées sur une carte d'activité cumulée le temps d'une avalanche. Nous présentons sur la figure 5.8 trois cartes d'activité correspondant à trois différentes avalanches avec, respectivement, un module élastique $E = 10^{-1}, 10^0, 10^1$ et ceci pour un système de taille $L = 256$. Les structures formées sont analogues aux structures exposées dans le chapitre précédent, avec une forme allongée et orientée en $\pm 45^\circ$. De plus, la taille des avalanches décroît comme prévu lorsque le module élastique augmente. Pour mieux caractériser ces structures, nous

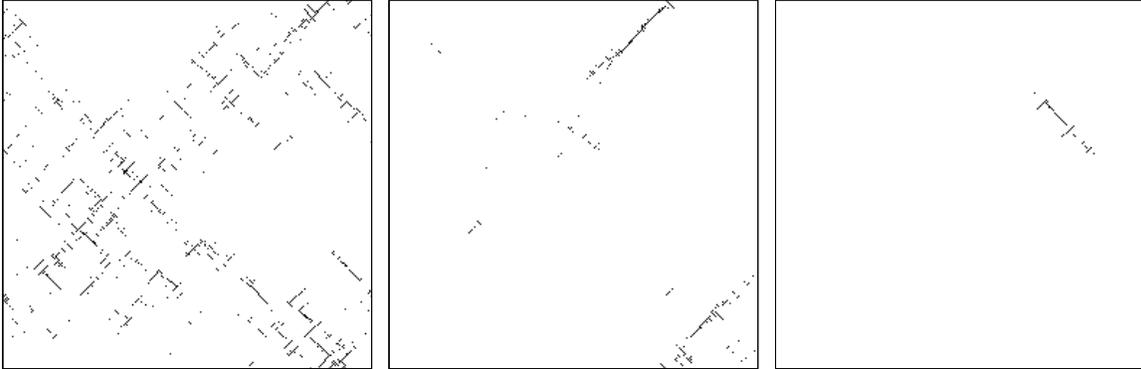


FIGURE 5.8: Cartes d'activité cumulée lors d'avalanches avec, respectivement, un module élastique $E = 10^{-1}, 10^0, 10^1$ et un système de taille $L = 256$. Les tailles maximales d'avalanche mesurées sont, respectivement, $S_{\Delta t} = 1616, 324, 81$.

allons quantifier leur déploiement sur le système en fonction de la taille de l'avalanche.

Pour commencer, afin d'analyser la dynamique à l'intérieur des avalanches, nous définissons un rayon caractéristique R tel que :

$$R = \sqrt{sd_x^2 + sd_y^2} \quad , \quad (5.10)$$

où sd_x et sd_y sont, respectivement, l'écart type des coordonnées x et y de tous les sites actifs faisant partie d'une avalanche donnée. Nous présentons sur la figure 5.9 la moyenne du rayon $\langle R \rangle$ en fonction de la taille de l'avalanche $S_{\Delta t}$ pour des systèmes de taille

$L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$ et un module élastique $E = 1$. Ceci nous permet de définir un exposant dynamique z_a tel que $R \propto S_{\Delta t}^{1/z_a}$: $z_a \approx 1$. Il est important de faire remarquer que cette loi de puissance n'est pas valable pour les grandes tailles d'avalanche en raison de la difficulté de définir les coordonnées x et y sous l'influence des conditions limites.

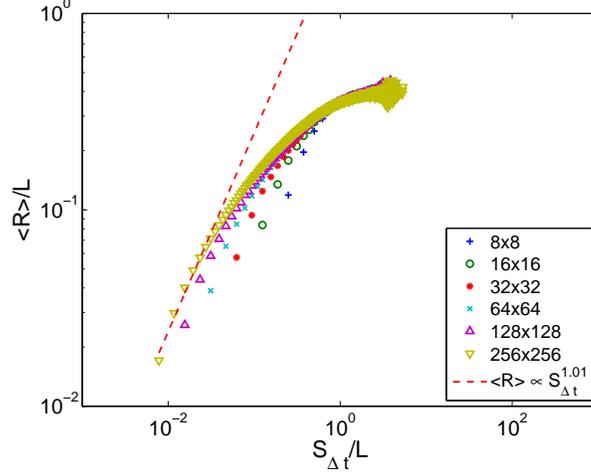


FIGURE 5.9: La moyenne du rayon caractéristique $\langle R \rangle$ en fonction de la taille de l'avalanche $S_{\Delta t}$, avec une remise à l'échelle par la taille du système $L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$ et pour un module élastique $E = 1$: un exposant dynamique $z_a \approx 1$.

Par la suite, en vue de quantifier la contribution relative des différents sites formant l'avalanche, nous utilisons un coefficient de participation C_p calculé comme suit :

$$C_p = \frac{\sum_i n_i^2}{(\sum_i n_i)^2} \quad , \quad (5.11)$$

où n_i est le nombre de fois qu'un site i a été activé lors de l'avalanche. Prenons l'exemple d'une avalanche de taille $S_{\Delta t}$ et dont la projection sur la carte d'activité forme une structure linéaire uniforme de longueur l (avec $1 \leq l \leq S_{\Delta t}$). Ainsi, l sites sont activés $S_{\Delta t}/l$ fois, contrairement aux $L^2 - l$ autres ayant une activité nulle. Par conséquent,

$$C_p = l(S_{\Delta t}/l)^2/S_{\Delta t}^2 = l^{-1} \quad . \quad (5.12)$$

Or, d'après les cartes d'activité exposées sur la figure 5.8, il est clair que, pour le cas qui nous intéresse, les structures ne forment pas nécessairement une ligne pleine et uniforme. Afin d'adapter l'équation 5.12, nous introduisons une notion statistique permettant d'analyser la manière avec laquelle les structures remplissent l'espace : la dimension fractale d_f . La masse de la structure globale M peut être ainsi décrite par : $M \propto l^{d_f}$. Ceci nous permet de réécrire l'équation 5.12 comme suit :

$$C_p \sim l^{d_f} (S_{\Delta t}/l^{d_f})^2/S_{\Delta t}^2 \sim l^{-d_f} \quad . \quad (5.13)$$

Sachant que $l \propto S_{\Delta t}^{1/z_a}$:

$$C_p \propto S_{\Delta t}^{-d_f/z_a} \quad , \quad (5.14)$$

avec $z_a \approx 1$.

En reprenant l'équation originale 5.11, il nous est possible de calculer le coefficient de participation de chaque avalanche. Ainsi, nous présentons sur la figure 5.10 la moyenne du coefficient de participation $\langle C_p \rangle$ en fonction de la taille de l'avalanche $S_{\Delta t}$ pour des systèmes de taille $L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$ et un module élastique $E = 1$. Ceci nous permet de définir une dimension fractale $d_f \approx 0.95 < 1$. Avec une valeur légèrement inférieure à 1, cette dimension fractale décrit assez bien les structures observées sur la figure 5.8. Ces structures ne sont pas composées de lignes pleines (le cas où $d_f = 1$) mais plutôt de petits segments alignés.

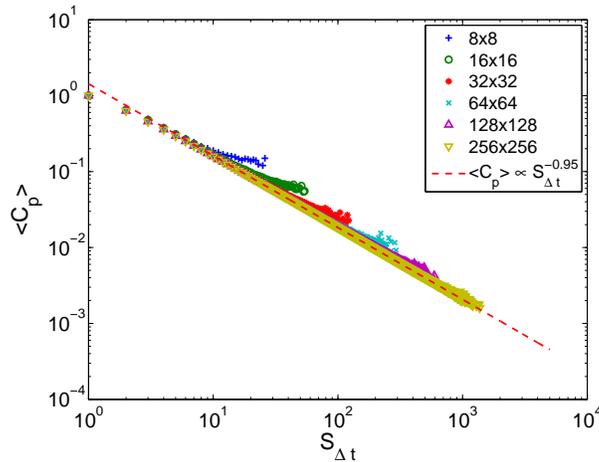


FIGURE 5.10: La moyenne du coefficient de participation $\langle C_p \rangle$ en fonction de la taille de l'avalanche $S_{\Delta t}$ pour différentes tailles de système $L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$ et un module élastique $E = 1$: une dimension fractale $d_f \approx 0.95 < 1$.

5.5 Conclusion

Après avoir précisé la définition d'une avalanche et analysé la distribution de leurs tailles $P(S_{\Delta t})$, nous avons pu mettre en évidence une loi de puissance $P(S_{\Delta t}) \propto S_{\Delta t}^\alpha$, avec $\alpha \approx -1.19$, avant que cette distribution ne décroisse exponentiellement vers une taille de coupure $S_{\Delta t}^*$. Cette dernière dépend à la fois de la raideur k et de la taille du système L . En fonction du module élastique $E = kL^2$, ces tailles de coupure décrivent une loi de puissance $S_{\Delta t}^* \propto L/E^{v_1,2}$, avec $v_1 = 1$ et $v_2 = 1/2$, respectivement, pour $E < E^*$ et $E > E^*$, où le module critique $E^* = 1$. Sur les cartes d'activité, et avec un exposant dynamique $z_a = 1$, nous avons pu remarquer que ces avalanches forment des structures allongées et orientées en $\pm 45^\circ$, composées de petits segments alignés et décrites par une dimension fractale $d_f \approx 0.95 < 1$.

Chapitre 6

Comportement du modèle près du seuil critique

Faisant partie de la famille des modèles de *pinning*, le modèle utilisé dans le cadre de cette étude sur la plasticité des matériaux amorphes nous permet dans ce chapitre d'analyser les distributions des forces de *depinning* ("dépinglage" ou "décrochage"). Ces analyses sont similaires à celles réalisées sur les modèles de propagation d'interface élastique utilisés pour le mouillage et la fracture.

Pour les résultats exposés dans ce chapitre, nous rappelons que les seuils locaux de plasticité sont tirés au sort avec une distribution uniforme $\sigma_Y \in [0, 1]$, de même que les incréments locaux de déformation plastique $\delta \in [0, 1]$.

6.1 Distributions des forces de *depinning*

Il est temps à présent de rappeler que le modèle utilisé est basé sur un critère local de plasticité σ_Y et d'une dynamique extrémale imposant des conditions quasi-statiques. Autrement dit, la contrainte externe σ_{ext} est ajustée de manière à plastifier un seul site à la fois de sorte que :

$$\sigma_{ext}(t) = \sigma_Y(t, k^*) - \sigma_{el}(t, k^*) = \min_k \{ \sigma_Y(t, k) - \sigma_{el}(t, k) \} \quad , \quad (6.1)$$

où $k = 1, 2, \dots, L^2$, l'indice de chaque site formant un système de taille L , et k^* est le site extrémal au temps t .

La figure 6.1(a) représente un segment de 1000 pas de temps d'une série de forces de *depinning* $\sigma_c(t) = \sigma_{ext}(t)$ et la valeur du seuil critique, la force de *depinning* maximale $\sigma^* = \max_t \{ \sigma_c(t) \}$. La distribution des forces de *depinning* $P(\sigma_c)$ correspondante est exposée sur la figure 6.1(b). Sur la base des études antérieures [90], l'objectif est de mettre en évidence un comportement universel des distributions des forces de *depinning* $P(\sigma_c)$ à l'approche du seuil critique σ^* . Quelle est la valeur exacte de ce seuil critique σ^* ?

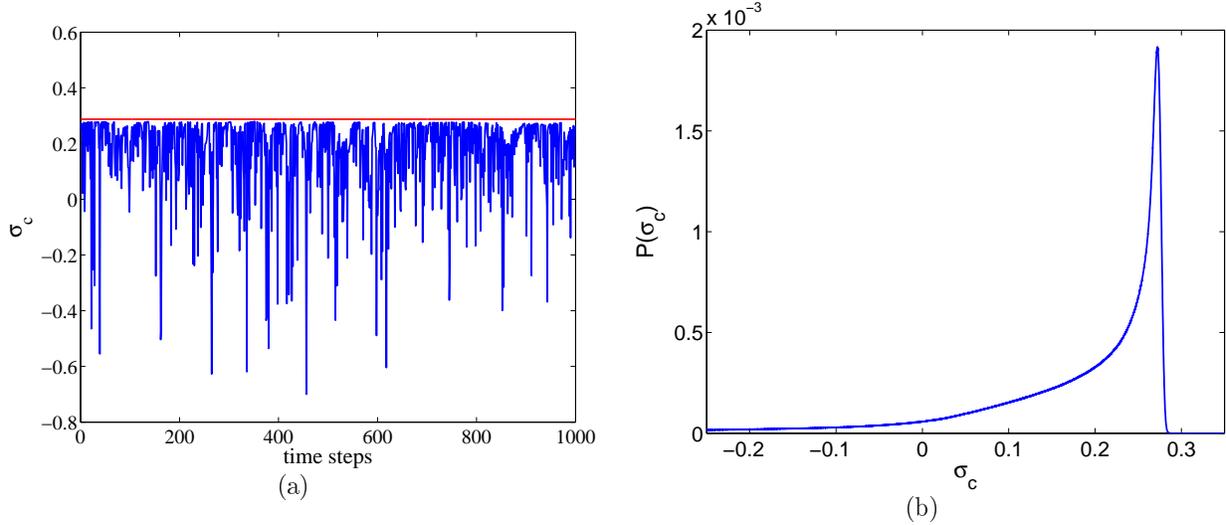


FIGURE 6.1: (a) Fluctuations des forces de *depinning* σ_c pour un système de taille $L = 256$ et sur une section de 1000 pas de temps. La ligne horizontale en rouge représente la valeur du seuil critique σ^* . (b) Distribution des forces de *depinning* $P(\sigma_c)$ correspondante.

6.2 Détermination du seuil critique

Basée sur les résultats d'un système de taille L , la valeur du seuil critique σ^* est biaisée par l'effet de taille finie du système. Pour déterminer précisément σ^* , nous conditionnons la distribution des forces de *depinning* par la distance $d = \max\{|\Delta x|, |\Delta y|\}$ entre deux sites actifs consécutifs. Les distributions résultantes $P(\sigma_c, d)$ décrivent les fluctuations des forces de *depinning* d'un sous-système de taille d . Nous prévoyons que les distributions convergeront vers une distribution de *Dirac* centrée à σ^* lorsque la distance d tendra vers l'infini, puisque toutes les configurations prises en compte seront critiques. En d'autres termes, la valeur moyenne et l'écart type des distributions conditionnées convergeront respectivement vers σ^* et vers 0 lorsque la distance d tendra vers l'infini. Ces prévisions sont rapidement confirmées par les observations que nous pouvons faire d'après la figure 6.2. Les distributions conditionnées convergent vers une distribution plus étroite et avec une valeur moyenne plus élevée pour une distance d croissante.

En traçant les écarts types $sd_{\sigma_c}(d)$ en fonction des valeurs moyennes $\langle \sigma_c \rangle(d)$ des forces de *depinning* pour différentes distances d , il est possible de définir un seuil critique par extrapolation, $d \rightarrow \infty$. Ainsi, nous obtenons un seuil critique $\sigma^* \approx 0.276$ (Fig. 6.3).

Conformément aux résultats présentés dans la section 3.2.2 sur la saturation de la courbe contrainte/déformation, ce seuil critique dépend de l'amplitude des incréments locaux de déformation plastique et de la distribution de probabilité des seuils locaux de plasticité choisie.

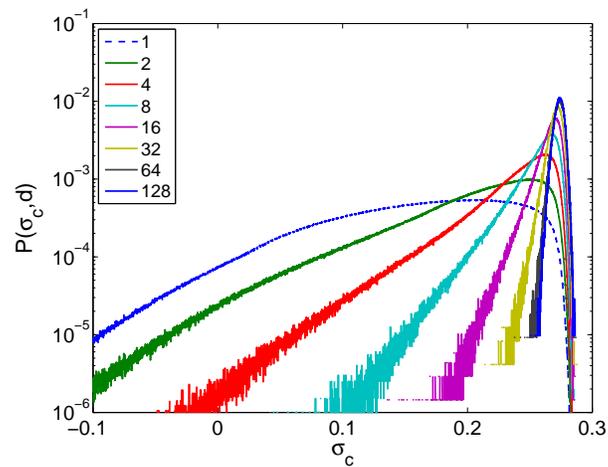


FIGURE 6.2: Distribution des forces de *depinning* $P(\sigma_c, d)$ pour différentes distances $d = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128$ et pour un système de taille $L = 256$: les distributions conditionnées convergent vers une distribution *Dirac* centrée à σ^* .

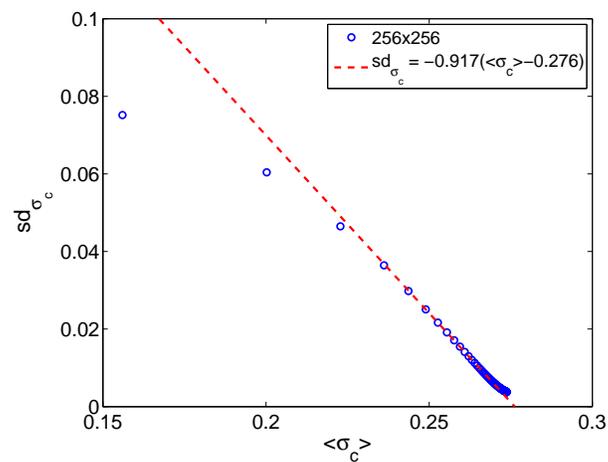


FIGURE 6.3: L'écart type des forces de *depinning* sd_{σ_c} en fonction de leur moyenne $\langle \sigma_c \rangle$ pour un système de taille $L = 256$: par extrapolation, le seuil critique est estimé à $\sigma^* \approx 0.276$.

6.3 Comportement universel près du seuil critique

Lors de leurs travaux sur le *depinning* d'une ligne élastique dans un milieu désordonné par l'étude d'un modèle extrémal, *D. Vandembroucq et coll.* [90] ont pu observer que les distributions successives des forces de *depinning* possèdent la même forme avec des facteurs d'échelle. Les distributions conditionnées par la distance d peuvent être ainsi superposées sur une courbe maîtresse par la remise à l'échelle suivante :

$$P(\sigma_c, d) = \frac{1}{d^{-b}} \psi \left(\frac{\sigma^* - \sigma_c}{d^{-b}} \right) . \quad (6.2)$$

Les conséquences directes d'une telle remise à l'échelle impliquent que :

$$\delta\sigma_c(d) = \sigma^* - \langle\sigma_c\rangle(d) \propto d^{-b} , \quad (6.3)$$

$$sd_{\sigma_c}(d) = \sqrt{\langle\sigma_c^2\rangle(d) - \langle\sigma_c\rangle^2(d)} \propto d^{-b} , \quad (6.4)$$

et qu'il existe une dépendance linéaire entre $\langle\sigma_c\rangle(d)$ et $sd_{\sigma_c}(d)$.

Premièrement, si nous appliquons la même remise à l'échelle aux distributions issues du modèle $2D$ utilisé ici pour la plasticité des matériaux amorphes, le comportement de la moyenne des forces de *depinning* $\langle\sigma_c\rangle(d)$ (Fig. 6.4(a)) et celui de leur écart type $sd_{\sigma_c}(d)$ (Fig. 6.4(b)), en fonction de la distance d , correspondent effectivement à une loi de puissance (Eq. 6.3 et 6.4) avec $b \approx 0.94$. Ces comportements en loi de puissance ne sont pas valides pour des petites distances, car ils décrivent des sous-systèmes trop petits, et pour des grandes distances, ils sont dominés par l'effet des conditions limites. Les distances ainsi exploitées sont restreintes à un petit intervalle vue la taille des systèmes étudiés. Pour un système de taille $L = 256$, la régression linéaire a été effectuée sur l'intervalle $d \in [5, 20]$.

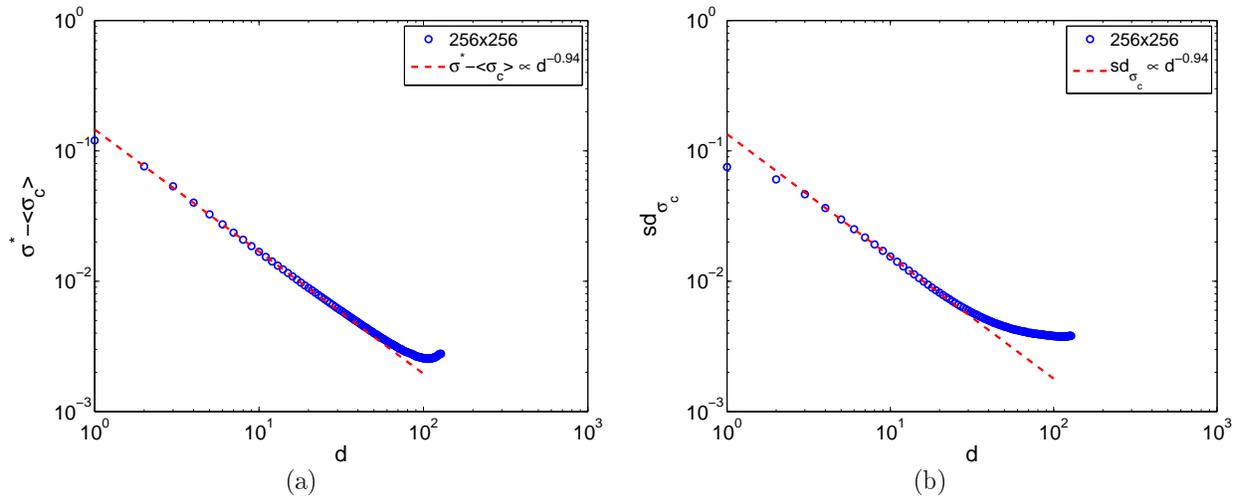


FIGURE 6.4: Pour un système de taille $L = 256$: (a) La différence entre le seuil critique et la moyenne des forces de *depinning* $\delta\sigma_c$ en fonction de la distance d : $\delta\sigma_c \propto d^{-b}$ où $b \approx 0.94$. (b) L'écart type des forces de *depinning* sd_{σ_c} en fonction de la distance d : $sd_{\sigma_c} \propto d^{-b}$ où $b \approx 0.94$.

Deuxièmement, il est facile de constater par la figure 6.3 que la moyenne des forces de *depinning* $\langle \sigma_c \rangle$ est linéaire en fonction de leur écart type sd_{σ_c} pour $d \in [5, 20]$, l'intervalle utilisé pour l'extrapolation linéaire.

Utilisant donc la remise à l'échelle proposée par l'équation 6.2, la figure 6.5 représente les distributions conditionnées successives pour $d = 4, 8, 16, 32$. Nous constatons qu'elles ne

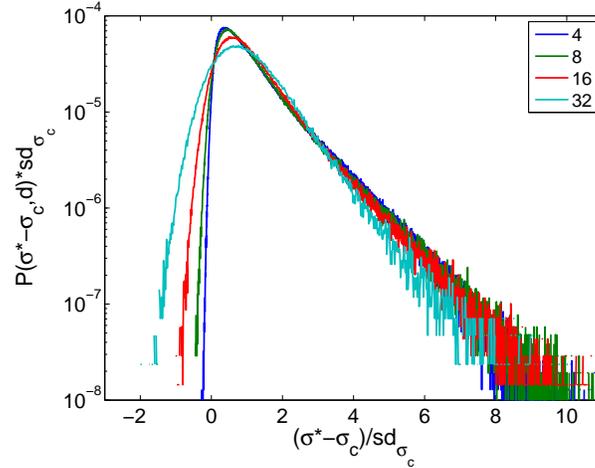


FIGURE 6.5: Superposition des différentes distributions des forces de *depinning* $P(\sigma_c, d)$ pour $d = 4, 8, 16, 32$ et un système de taille $L = 256$: la superposition n'est que partielle.

sont pas parfaitement superposées. Contrairement aux résultats de la ligne élastique [90], il ne semble pas exister une courbe maîtresse universelle. Les facteurs d'échelle paraissent insuffisants. La dimension du modèle, le caractère anisotrope de la localisation des sites "dépinnglés" et la petite taille des systèmes peuvent faire partie des raisons à l'origine de l'aspect partiel de cette remise à l'échelle.

Nous pouvons tout de même étudier le comportement d'une telle remise à l'échelle en fonction de la direction angulaire. En raison du caractère anisotrope du modèle, nous faisons la distinction entre d_+ et d_- par θ , la direction angulaire entre deux sites actifs, de telle manière que :

$$d \rightarrow d_+ \quad \text{pour} \quad \pi/8 \leq \theta \leq 3\pi/8 \quad , \quad (6.5)$$

$$d \rightarrow d_- \quad \text{ailleurs} \quad . \quad (6.6)$$

Il apparaît que, pour différentes valeurs de d_+ (Fig. 6.6(a)) et de d_- (Fig. 6.6(b)), la superposition des distributions des forces de *depinning* est invariablement partielle. En revanche, pour d_+ , les distributions sont, respectivement, comparables à celles présentées dans la figure 6.5, tandis que pour d_- , nous remarquons qu'elles tendent vers une forme gaussienne pour les grandes distances.

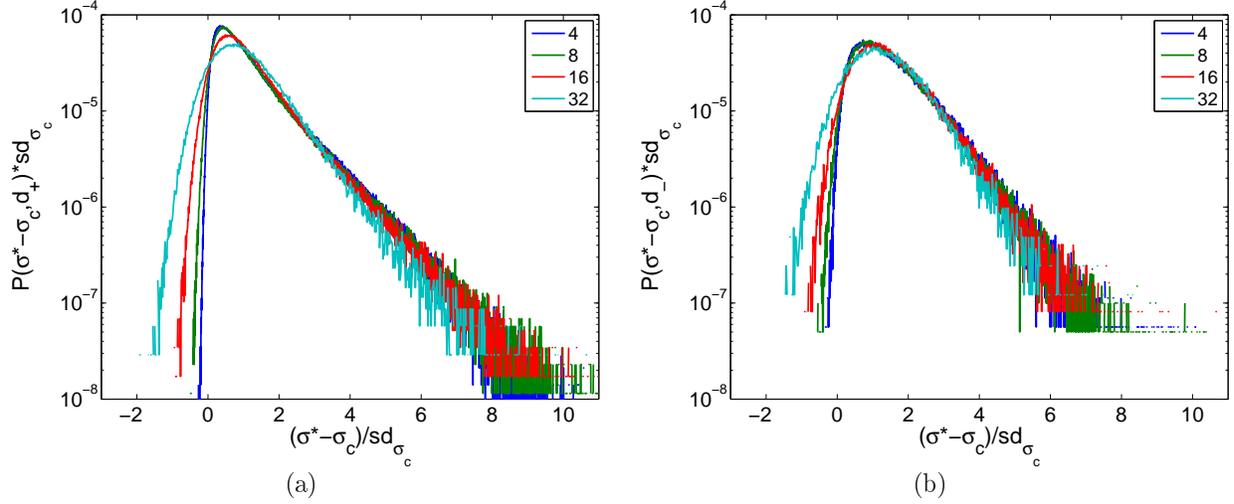


FIGURE 6.6: (a) Superposition des différentes distributions des forces de *depinning* $P(\sigma_c, d_+)$ pour $d_+ = 4, 8, 16, 32$ et un système de taille $L = 256$. (b) Idem que (a) mais pour $P(\sigma_c, d_-)$.

6.4 Caractérisation de la population sous-critique

Afin de mieux analyser la dynamique près du seuil critique, nous pouvons également examiner les forces de *depinning* individuelles :

$$\sigma_{ck}(t) = \sigma_Y(t, k) - \sigma_{el}(t, k) \quad , \quad (6.7)$$

où $k = 1, 2, \dots, L^2$ est l'indice de chaque site d'un système de taille L . La figure 6.7 représente la distribution de toutes les forces de *depinning* individuelles $P(\sigma_{ck})$ avec, en ligne pointillée, le niveau du seuil critique $\sigma^* \approx 0.276$. Nous pouvons clairement distinguer deux différentes populations de sites. Les sites ayant une force de *depinning* supérieure au seuil critique ($\sigma_{ck} > \sigma^*$) forment la population majoritaire. De plus, les distributions de leurs forces de *depinning* paraissent similaires pour différentes tailles de système $L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$. En revanche, les distributions des forces de *depinning* des sites sous-critiques ($\sigma_{ck} < \sigma^*$) semblent dépendre de L .

Sur la figure 6.8, nous avons tracé la proportion des sites sous-critiques $P(\sigma_{ck} < \sigma^*)$ en fonction de la taille du système L . Le poids relatif de la partie sous-critique en fonction de la taille du système est décrit par une loi de puissance telle que :

$$P(\sigma_{ck} < \sigma^*) \propto L^{-s} \quad , \quad (6.8)$$

avec $s \approx 1.34$. Ceci nous permet de définir une dimension fractale d_s de l'ensemble des sites sous-critiques :

$$P(\sigma_{ck} < \sigma^*) \propto L^{d_s} / L^2 \quad , \quad (6.9)$$

ainsi, $d_s = s + 2 \approx 0.66$. Il est à noter que la dimension fractale pour une ligne élastique est approximativement de 0.35 [90].

Ces sites sous-critiques jouent évidemment un rôle très important. Une des perspectives intéressantes est d'analyser cette population sous-critique tout en tenant compte du fait

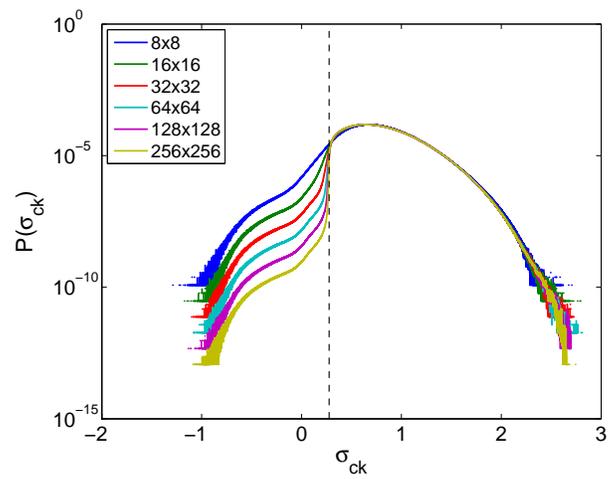


FIGURE 6.7: Distribution des forces de *depinning* individuelles $P(\sigma_{ck})$ pour différentes tailles de système $L = 8, 16, 32, 64, 128, 256$; la ligne pointillée indique le seuil critique σ^* : la partie sous-critique ($\sigma_{ck} < \sigma^*$) dépend de la taille du système L .

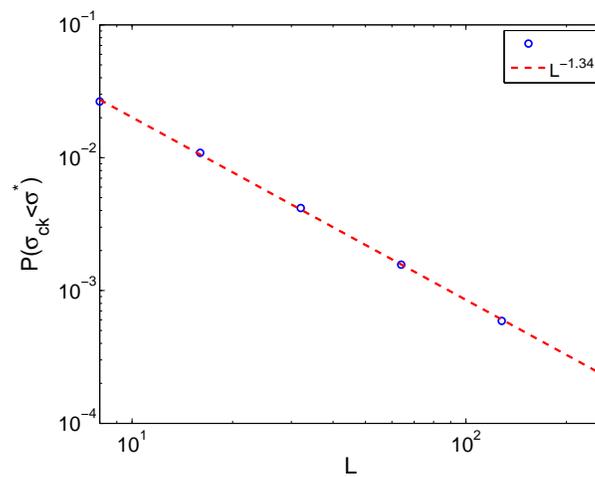


FIGURE 6.8: Le poids relatif de la partie sous-critique $P(\sigma_{ck} < \sigma^*)$ en fonction de la taille du système L : décrit par une loi de puissance $P(\sigma_{ck} < \sigma^*) \propto L^{-s}$ avec $s \approx 1.34$.

qu'un site donné peut être sous-critique à l'instant t et ne plus l'être à l'instant $t + 1$ sans pour autant avoir été "dépinglé" mais simplement relaxé en raison des contributions négatives de la fonction de *Green*. Nous pourrions ainsi étudier, par exemple, le lien qu'il peut y avoir entre le temps de séjour d'un site, le nombre de pas de temps durant lesquels il reste dans la zone sous-critique avant de "dépingler" et/ou quitter cette zone, et son âge, le nombre de pas de temps depuis sa dernière activation.

6.5 Conclusion

Caractérisé par une dynamique extrémale avec des conditions quasi-statiques, ce modèle de plasticité nous a permis d'analyser les distributions des forces de *depinning*. En faisant tendre la taille du sous-système étudié vers l'infini, les distributions tendent vers une distribution *Dirac* centrée à un seuil critique σ^* . Ce dernier peut être défini par l'extrapolation de l'écart type des forces de *depinning* en fonction de leur moyenne, de telle façon que le croisement entre cette extrapolation et l'axe de la moyenne représente σ^* . Ensuite, nous avons tenté de superposer ces distributions sur une courbe maîtresse, révélant une forme universelle, mais la remise à l'échelle utilisée s'est avérée insuffisante. Parallèlement, nous avons pu déterminer la proportion des sites sous-critiques par l'étude des forces de *depinning* individuelles et ainsi définir leur dimension fractale $d_s \approx 0.66$.

Conclusion et perspectives

Partant de l'hypothèse que la déformation plastique macroscopique des matériaux amorphes est une succession de réorganisations individuelles et localisées, nous avons développé pour ce travail de thèse un modèle mésoscopique, appartenant à la famille des modèles de *pinning*, pour étudier l'effet des interactions élastiques induites par ces réarrangements sur le comportement plastique. Après avoir présenté le modèle et la solution analytique de la réponse élastique à une déformation plastique en cisaillement d'une inclusion au chapitre 1, nous nous sommes concentrés au chapitre 2 sur le passage discret/continu de cette dernière qui demeure un point clé et très sensible aux détails numériques.

Ce modèle nous a permis en premier lieu de retrouver un comportement macroscopique comparable à celui obtenu lors d'un test mécanique et de fournir une interprétation statistique pour le phénomène d'écroutissage au chapitre 3. Au chapitre 4, nous avons pu démontrer que les événements successifs sont fortement corrélés et ainsi mettre en évidence la localisation de ces événements avec une anisotropie des positionnements relatifs, caractérisée par la même symétrie quadripolaire que la fonction de redistribution des contraintes élastiques. Au-delà du comportement du modèle en tant que simple succession de réarrangements individuels et localisés, nous avons étudié le phénomène d'avalanche d'événements plastiques au chapitre 5. Le chapitre 6, quant à lui, a été consacré à l'analyse des forces de *depinning* au voisinage de seuil critique et la caractérisation de la proportion des sites sous-critiques.

Les résultats de ce modèle scalaire, basé sur la "compétition" entre désordre et interactions élastiques, suggèrent plusieurs perspectives :

- Dans les simulations présentées, nous avons imposé aux déformations locales la même direction que la déformation macroscopique en cisaillement du système. Afin d'ajouter un degré de liberté et ainsi espérer mieux analyser les réarrangements locaux, un désordre directionnel peut être implémenté dans le modèle.
 - Pour une description plus réaliste de la plasticité des amorphes, ce modèle, qui est scalaire, doit prendre en compte l'aspect tensoriel du problème. Il est essentiel de permettre au système des modifications locales tant en terme de cisaillement que de volume. Ceci constitue sans doute un point très important pour la compréhension des mécanismes de déformation.
 - Pour pouvoir atteindre des systèmes de grande taille et ainsi parfaire les analyses d'un tel modèle mésoscopique, il est envisageable de développer une version avec une discrétisation sur un réseau hiérarchique.
-

- Dans le cadre du travail présenté en annexe A sur l'identification des zones de réorganisation, le développement d'un procédé permettant une caractérisation plus fine de ces réarrangements avec des simulations de type dynamique moléculaire peut être suggéré.

Ce modèle statistique à l'échelle mésoscopique, *a priori* basé sur des ingrédients très simples, ouvre donc divers champs de travail intéressants.

Annexe A

Identification d'événements plastiques localisés par intégrale de contour

Partant du principe mécanique élémentaire des zones de réorganisation structurelle ("*shear transformation zones*", *STZ*) pour décrire la plasticité des matériaux amorphes, une question cruciale est : comment identifier et analyser ces régions ? Plusieurs études numériques ont récemment été réalisées pour identifier ces événements plastiques élémentaires localisés par des simulations en dynamique moléculaire de matériaux amorphes sous cisaillement : avec des verres *Lennard-Jones* [25, 24] et des verres métalliques [54], par exemple.

De manière analogue à l'intégrale J de *Rice* [91], développée pour estimer l'intensité d'une singularité d'un champ de contrainte autour d'un front de fissure, l'objectif ici est de capter les singularités du champ de contrainte induit par les déformations plastiques locales. À grande distance, ces réorganisations peuvent être traitées comme des inclusions d'*Eshelby* [78]. Nous développons en deux dimensions une approche simple basée sur le formalisme de *Kolossov-Muskhelichvili* [79] du plan élastique.

Ce formalisme nous permet de réécrire, par une expansion en loi de puissance des variables du plan complexe, les champs de déplacement et de contrainte élastique induits par une inclusion plastique. Loin du centre de la zone déformée, les contributions dominantes sont associées au premier ordre des singularités, de symétrie dipolaire ou quadripolaire, correspondant respectivement à une déformation plastique volumique pure ou à une déformation déviatorique pure d'une inclusion circulaire. Par la construction de fonctions holomorphes à partir du champ de déplacement et de ses dérivées, il est possible de définir une intégrale de Cauchy au contour indépendant afin de capter l'amplitude de ces singularités.

Les expressions analytiques ainsi que des tests numériques, basés sur des simulations par éléments finis, sont présentés dans la publication que nous avons mise en pièce jointe. Malgré la satisfaction des propriétés d'orthogonalité et d'indépendance vis à vis du contour choisi, la robustesse numérique de cette méthode s'avère faible en raison de la nécessité d'évaluer les dérivées du champ de déplacement.

Path-independent integrals to identify localized plastic events in two dimensionsMehdi Talamali,¹ Viljo Petäjä,¹ Damien Vandembroucq,^{1,2} and Stéphane Roux³¹*Unité Mixte CNRS–Saint-Gobain “Surface du Verre et Interfaces”, 39 Quai Lucien Lefranc, 93303 Aubervilliers cedex, France*²*Laboratoire PMMH, ESPC, CNRS, Paris 6, Paris 7, 10 rue Vauquelin, 75231 Paris cedex 05, France*³*LMT-Cachan, ENS de Cachan, CNRS-UMR 8535, Université Paris 6, PRES UniverSud, 61 avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan cedex, France*

(Received 28 January 2008; revised manuscript received 2 June 2008; published 22 July 2008)

We use a power expansion representation of plane-elasticity complex potentials due to Kolossov and Muskhelishvili to compute the elastic fields induced by a localized plastic deformation event. Far from its center, the dominant contributions correspond to first-order singularities of quadrupolar and dipolar symmetry which can be associated, respectively, with pure deviatoric and pure volumetric plastic strain of an equivalent circular inclusion. By construction of holomorphic functions from the displacement field and its derivatives, it is possible to define path-independent Cauchy integrals which capture the amplitudes of these singularities. Analytical expressions and numerical tests on simple finite-element data are presented. The development of such numerical tools is of direct interest for the identification of local structural reorganizations, which are believed to be the key mechanisms for plasticity of amorphous materials.

DOI: [10.1103/PhysRevE.78.016109](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.78.016109)

PACS number(s): 62.20.F–, 46.15.–x, 02.30.Fn, 81.05.Kf

I. INTRODUCTION

The plasticity of amorphous materials has motivated an increasing amount of study in recent years. In the absence of an underlying crystalline lattice in materials such as foams, suspensions, or structural glasses, it is generally accepted that plastic deformation results from a succession of localized structural reorganizations [1–4]. Such changes of local structure release part of the elastic strain to reach a more favorable conformation and induce long-range elastic fields. The details of such local rearrangements and of the internal stress they induce obviously depend on the precise structure of the material under study, and its local configuration. However, the important observation is that outside the zone of reorganization a *linear elastic behavior prevails*. Therefore, elastic stresses can be decomposed onto a multipolar basis and, independently of the material details, it is possible to extract singular, scale-free, dominant terms which can be associated with a global pure deviatoric or pure volumetric local transformation of an equivalent circular inclusion. In particular, the elastic shear stress induced by a localized plastic shear exhibits a quadrupolar symmetry. This observation has motivated the development of statistical models of amorphous plasticity at the mesoscopic scale based upon the interaction of disorder and long-range elastic interactions [5–8]. In the same spirit, statistical models were also recently developed to describe the plasticity of polycrystalline materials [9]. Several numerical studies have been performed recently to identify these elementary localized plastic events in athermal or molecular dynamics simulations of model amorphous materials under shear [10,11].

The question remains of how to identify and analyze these transformation zones. In analogy with the path-independent Rice J integral [12] developed to estimate the stress intensity factor associated with a crack tip stress singularity, we aim here at capturing the stress singularity induced by the local plastic transformation which can be treated as an Eshelby inclusion [13]. In two dimensions, we develop a simple ap-

proach based upon the Kolossov-Muskhelishvili (KM) formalism of plane elasticity [14]. This is an appealing pathway to the solution since these zones will appear as poles for the potentials, and hence Cauchy integrals may easily lead to contour integral formulations which are independent of the precise contour geometry, but rather rely on its topology with respect to the different poles that are present.

Although these techniques have been mostly used in the context of numerical simulations in order to estimate stress intensity factors from finite-element simulations, they are now called for to estimate stress intensity factors from experimentally measured displacement fields from, e.g., digital image correlation techniques. In this case, interaction integral techniques [15] or least squares regression [16] techniques have been applied. Noise-robust variants have also been proposed [17]. These routes could also be followed in the present case.

Though the present work is restricted to two dimensions due to the complex potential formulation, similar questions can be addressed for the three-dimensional version of this problem using the same strategy but a different methodology. In the following, we briefly recall the KM formalism, we give analytic expressions for the contour integrals allowing us to capture the singular elastic fields, and we present a few numerical results based on a finite-element simulation supporting our analytical developments.

In Sec. II, we present the theoretical basis of our approach in terms of singular elastic fields, while in Sec. III we introduce the contour integral formulation. In Sec. IV, a numerical implementation based on finite-element simulations is presented, together with the results of the present approach. This application allows us to evaluate the performance and limitations of the contour integral procedure and check the detrimental effect of discreteness. Section V presents the main conclusions of our study.

II. POTENTIAL FORMULATION

In two dimensions, the Kolossov-Muskhelishvili potentials can be used to write the elastic stress and displacement

fields \mathbf{U} and σ [14]. Using a complex formulation, we introduce the elastic displacement $\mathbf{U}=U_x+iU_y$ and the stress tensor field through two functions, the real trace $S_0=\sigma_{xx}+\sigma_{yy}$ and the complex function $\mathbf{S}=\sigma_{yy}-\sigma_{xx}+2i\sigma_{xy}$. In the framework of linear elasticity, the balance and compatibility equations can be rewritten as

$$S_{0,z}-\mathbf{S}_{,\bar{z}}=0, \quad (1)$$

$$S_{0,\bar{z}\bar{z}}=0, \quad (2)$$

where $z=x+iy$ is the complex coordinate and the notation $A_{,x}$ is used to represent the partial derivative of field A with respect to coordinate x . Note that we assumed zero surface density force and that Eq. (2) is here the classical Beltrami equation which expresses the kinematic compatibility condition in terms of stress. The general solution to these equations can be obtained through the introduction of two holomorphic functions φ and ψ , called the KM potentials. The displacement and the stress field can be written [14]

$$2\mu\mathbf{U}=\kappa\varphi(z)-z\overline{\varphi'(z)}-\overline{\psi(z)}, \quad (3)$$

$$S_0=2[\varphi'(z)+\overline{\varphi'(z)}], \quad (4)$$

$$\mathbf{S}=2[\bar{z}\varphi''(z)+\psi'(z)], \quad (5)$$

where μ is the elastic shear modulus and $\kappa=(3-4\nu)$ for plane strain and $(3-\nu)/(1+\nu)$ for plane stress, ν being the Poisson ratio.

III. PLASTIC INCLUSION AND SINGULARITY APPROACH IN TWO DIMENSIONS

A. Singular terms associated with plastic inclusion

This KM formalism can be applied to two-dimensional inclusion problems [18,19]. Let us consider the case of a small inclusion of area \mathcal{A} experiencing plastic deformation and located at the origin of the coordinate system $z=0$. It is assumed that the stress is a constant at infinity. Outside the inclusion, the KM potentials can be expanded as a Laurent series as

$$\varphi(z)=\alpha^{\text{out}}z+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\varphi_n}{z^n}, \quad \psi(z)=\beta^{\text{out}}z+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\psi_n}{z^n}. \quad (6)$$

The linear terms can be easily identified as corresponding to uniform stresses while constant terms (omitted here) would lead to a rigid translation. It can be shown in addition that the dominant singular terms φ_1/z and ψ_1/z can be associated with the elastic stress induced by the plastic deviatoric and volumetric strain of an equivalent circular inclusion of area \mathcal{A} . That is, considering a circular inclusion experiencing a plastic shear strain γ_p and a plastic volumetric strain δ_p we have [18]

$$\varphi_1=\frac{2i\mu\mathcal{A}\gamma_p}{\pi(\kappa+1)}, \quad \psi_1=-\frac{2\mu\mathcal{A}\delta_p}{\pi(\kappa+1)}. \quad (7)$$

In particular, for a pure shear plastic event we obtain a quadrupolar symmetry:

$$\sigma_{xy}=-\frac{2\gamma_p\mu}{\kappa+1}\frac{\mathcal{A}}{\pi r^2}\cos(4\theta). \quad (8)$$

Note that we have in general to consider a complex value of γ_p to include the angular dependence of the principal axis. In contrast, the amplitude ψ_1 is a real number (note that the imaginary part would correspond to a pointlike torque applied at the origin).

B. Generic character of the expansion

Because of the well-known property of Eshelby circular inclusion, the above expansion limited to the ψ_1 and ϕ_1 terms only is the exact (outer) solution of a uniform plastic strain distributed in the inclusion, and vanishing stress at infinity. However, one should note that this result is much more general. Indeed, it is seen that the physical size of the inclusion does not enter into the solution except through the products $\mathcal{A}\gamma_p$ and $\mathcal{A}\delta_p$. Therefore, a smaller inclusion having a larger plastic strain may give rise to the very same field, provided the products remain constant. Thus one can consider the prolongation of the solution to a pointlike inclusion (with a diverging plastic strain) as being equivalent to the inclusion.

Then from the superposition property of linear elasticity, a heterogeneous distribution of plastic strain $\gamma_p(x)$ in a compact domain \mathcal{D} will give rise to such a singularity with an amplitude equal to

$$[\mathcal{A}\gamma_p]_{\text{eq}}=\int_{\mathcal{D}}\int\gamma_p(x)dx \quad (9)$$

and the same property would hold separately for the volumetric part. As a particular case, one finds a uniform plastic strain for an inclusion of arbitrary shape.

This is the key property that allows us to capture the equivalent plastic strain of an arbitrary complex configuration, for the above mentioned application to amorphous media. In fact, this is even the only proper way of defining the plastic strain for a discrete medium as encountered in molecular dynamics simulations. The far-field behavior of the displacement and stress field can be accurately modeled, and without ambiguity, by a continuum approach, and thus the above result will hold. In contrast, locally, the large-scale displacement of several atoms may render difficult the direct computation of the equivalent plastic strain experienced in such an elementary plastic event.

Let us, however, stress one difficulty: As the above argument ignores the details of the action taking place within the ‘‘inclusion,’’ plasticity has to be postulated. However, a damaged inclusion, where the elastic moduli have been softened by some mechanism, or even a nonlinear elastic inclusion at one level of loading, would behave in a similar way to the above plastic inclusion. Obviously, to detect the most relevant physical description, one should have additional information, say about unloading. If the above amplitudes remain constant during unloading, plasticity would appear appropriate. If the amplitude decreases linearly with the loading, then damage is more suited. Finally, if the amplitudes varies reversibly with the loading, nonlinear elasticity might be the

best description. Thus, although one should be cautious in the interpretation, local damage detection from the far field may also be tackled with the same tools.

C. Path-independent contour integrals

In two dimensions, this multipole expansion formalism in the complex plane suggests resorting to contour integrals to extract the singularities. However, the displacement field is not a holomorphic function and cannot be used directly for that purpose. The strategy of identification of the singularities φ_n and ψ_n thus consists of expressing the potentials from the displacement field and its derivatives in order to extract the singularities via Cauchy integrals. We now simply express the displacement field and its derivatives:

$$2\mu U = \kappa\varphi(z) - z\overline{\varphi'(z)} - \overline{\psi(z)}, \quad (10)$$

$$2\mu U_{,z} = \kappa\varphi'(z) - \overline{\varphi'(z)}, \quad (11)$$

$$2\mu U_{,\bar{z}} = -z\overline{\varphi''(z)} - \overline{\psi'(z)}, \quad (12)$$

$$2\mu U_{,z\bar{z}} = -\overline{\varphi''(z)}. \quad (13)$$

This gives immediately

$$\varphi'(z) = \frac{2\mu}{\kappa-1}(\kappa U_{,z} + \overline{U_{,\bar{z}}}), \quad (14)$$

$$\varphi''(z) = -2\mu\overline{U_{,z\bar{z}}} = -\frac{\mu}{2}\overline{\nabla^2 U}, \quad (15)$$

$$\psi'(z) = -2\mu\left(\overline{U_{,\bar{z}}} - \frac{\bar{z}}{4}\overline{\nabla^2 U}\right). \quad (16)$$

Note that, except for a multiplicative constant, the two last expressions are independent of material properties. In light of the expansion (6) of φ and ψ in Laurent series, if a counterclockwise contour integration is considered along a path \mathcal{C} , Cauchy residues can be formed as

$$\varphi_n = \frac{i\mu}{4\pi n(n+1)} \int_{\mathcal{C}} z^{n+1} \overline{\nabla^2 U} dz, \quad (17)$$

$$\psi_n = \frac{i\mu}{\pi n} \int_{\mathcal{C}} z^n \left(\overline{U_{,\bar{z}}} - \frac{1}{4} \overline{z \nabla^2 U} \right) dz. \quad (18)$$

These expressions can thus be obtained from the sole knowledge of the displacement field, a quantity which can be accessed from experiments, or from atomistic simulations. In the case of first-order singularities [see Eq. (7)], the residue term thus depends only on the local plastic deformation (size and amplitude of deformation) and on the Poisson ratio ν of the material.

Reverting to Cartesian coordinates, where the contour is expressed as a function of the curvilinear abscissa s as $(x(s), y(s))$, the above expression can be written

$$\varphi_1 = \frac{\mu}{8\pi} \int_{\mathcal{C}} [-2(xy) + i(x^2 - y^2)] [(U_{x,xx} + U_{x,yy}) - i(U_{y,xx} + U_{y,yy})] \left(\frac{dx}{ds} + i \frac{dy}{ds} \right) ds,$$

$$\psi_1 = \frac{\mu}{4\pi} \int_{\mathcal{C}} \{2(ix - y)[(U_{x,x} - U_{y,y}) - i(U_{y,x} + U_{x,y})] - [i(x^2 + y^2)][U_{x,xx} + U_{x,yy} - i(U_{y,xx} + U_{y,yy})]\} \times \left(\frac{dx}{ds} + i \frac{dy}{ds} \right) ds. \quad (19)$$

IV. NUMERICAL IMPLEMENTATION

The ultimate goal of such a method would be to analyze numerical results obtained from molecular dynamics simulations of amorphous plasticity where such local structural reorganizations are expected to take place. This obviously raises the question of a well-defined method for writing the continuous displacement field from the data on the discrete displacements of particles [20] and more generally the question of the sensitivity to noise of the above expressions. The first point is beyond the scope of the present work and we leave it for later studies. We thus focus on the more restricted question of the numerical implementation and its efficiency in the case of artificially noise-corrupted displacement data.

The method relies on contour integrations of derived fields of the displacement. The latter point induces *a priori* a strong sensitivity to noise. To limit such effects, first and second derivatives are extracted via an interpolation of the local displacement field by polynomial functions of the spatial coordinates. Moreover, the path independence of the contour integrals allows one to perform spatial averages. We explore in the following the efficiency of this method for noisy data.

A. Numerical generation of elastic fields induced by plastic inclusions

Displacement fields are computed numerically using a finite-element code, with square elements and bilinear shape functions $\{1, x, y, xy\}$. Plane stress conditions of two-dimensional elasticity are used. The domain is a 150×150 square. Stress-free conditions are enforced all along the domain boundary. The Poisson ratio of the material is $\nu=0.20$. Since no quantitative values of the stress are used, the value of the Young's modulus is immaterial.

A plastic strain is implemented at the scale of one single isolated element. Within this element, the strain is the sum of a plastic uniform strain chosen at will, and an elastic strain. The latter is computed by solving for the two-dimensional elastic problem, ensuring force balance and kinematic continuity at all nodes including the nodes of the plastic element. The chosen kinematics is too crude to solve the elastic problem with a good accuracy at the scale of one single element. However, remote from the inclusion, the elastic perturbation is well accounted for, and since all our computations are

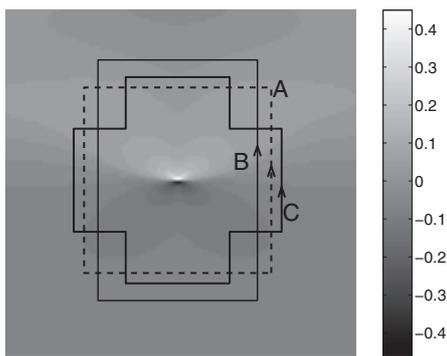


FIG. 1. Map of the displacement field U_y induced by a plastic shear strain of a central square element. The oriented paths indicate contours for integration.

based on paths lying at a distance from the inclusion, the formalism should be applicable. A single element allows us to have a maximum ratio between inclusion and domain size. The price to pay for this crude local description is that the quantitative estimate of $\mathcal{A}\gamma_p$ and $\mathcal{A}\delta_p$ will differ slightly from the theoretical expectation. Nevertheless the path independence (size, shape, center, etc.) is expected to hold.

We limited ourselves to such a description in order to mimic the difficulties one may face when having to deal with discrete element simulations. Indeed, the chosen finite-element shape functions do not allow us to use this description strictly speaking in order to compute second-order differential operators on the displacement, since the gradients of the latter are not continuous across element boundaries. Therefore, a regularization will be called for, as detailed below.

The choice of a regular square lattice is obviously oversimplified compared with the case of the random lattices associated with atomistic simulations. However, as the x and y directions are obviously equivalent for square elements and as linearity is preserved by the finite-element formulation, this formulation should not introduce any breaking of symmetry. More specifically, the displacement field induced by a quadrupole of principal direction off axis can be obtained by a linear superposition of x and y components of the displacement field induced by a quadrupole aligned with the axis weighted by the sine and cosine of the quadrupole angle.

Finally, the finite size of the system is also a specific difficulty encountered in practice, whereas the above argument uses the assumption of an infinite domain. However, such a boundary condition should not induce additional poles within the domain, and can be considered as a common practical difficulty encountered for all practical uses of this tool. All these arguments are possible causes of deviation from the theoretical expectation of path independence, and it thus motivates a detailed study of the method stability, robustness, and accuracy.

Two test cases are studied: (I) a central inclusion experiencing a shear strain $\gamma_p=1$ (because of linearity, the actual amplitude is meaningless) along the x axis; (II) a central inclusion experiencing a volumetric contraction $\delta_p=-1$. A map of the displacement fields U_y in case I is given in Fig. 1.

B. Interpolating displacement data

The key ingredient is to go from a continuous but nondifferentiable displacement field obtained from the finite-element simulation to an evaluation of the second derivative at any point in the domain. The results presented below have been obtained using the following procedure. A quadratic fit is performed on a square centered on one node to extract the first- and second-order derivatives, and the obtained values are used to compute the integrals by quadrature. An alternative method has been tested: for an integration from (x, y) to $(x+1, y)$, a simple fit is performed of the 12 nodes ranging from $(x-1)$ to $(x+2)$, and from $(y-1)$ to $(y+1)$, by the tensor product of polynomials $(1, x, x^2, x^3)$ and $(1, y, y^2)$ (12 functions). Then the integral of all required quantities can be computed. Estimates of derivatives using Fourier series with and without low-pass filtering have also been performed. All methods give similar results provided that the area of the region used for interpolation (or filtering) is comparable.

C. Path independence

We first check the path independence of the contour integral in the cases I and II of isolated inclusions. For that purpose, we use three families of contours, square (A), cross (B), and rectangular (C) shaped respectively as shown in Fig. 1. The size of these contours as well as their center can be varied. Figure 2 gives a summary of the results. For the three kinds of contours, we show the real and imaginary parts of the residues corresponding to Eq. (17). Note that the numerical results have been normalized according to the theoretical expectations (7) so that the expected numerical values are $\varphi_1=i, \psi_1=0$ in case I (Fig. 2, left) and $\varphi_1=0, \psi_1=1$ in case II (Fig. 2, right).

These numerical results can be considered as rather satisfactory in terms of orientation and orthogonality between modes φ_1 and ψ_1 : the measured values of quantities whose expected value is zero remain typically below 10^{-2} . When compared to their theoretical values, φ_1^{shear} and $\psi_1^{\text{contraction}}$ exhibit relative differences of around 5–10%. Small fluctuations (below 5%) can be found when the shape and size of the contours are varied. We already commented on the fact that the finite-element simulations are performed with a single element for the inclusion, a procedure which is obviously not reliable in terms of accuracy, but which allows us to have a large ratio between element and system size.

Another test of the numerical procedure is its dependence on the sole topology, i.e., location of the inclusion inside or outside the contour; we show in addition the dependence of the measured values of φ_1 and ψ_1 on the location of the contour center. Figure 3 shows the singularity ψ_1 measured from the integration of displacement field II along a square contour centered along the x axis. Results are normalized so that the expected value of $\text{Re}\psi_1$ is unity when the inclusion is within the contour and zero elsewhere. The contour size is $M=20$. We obtain the expected behavior: the values of $\text{Re}\psi_1$ shift from zero to unity depending on whether the inclusion is within or outside the contour. Significant fluctuations (10–20%) are, however, observed when the inclusion lies in the vicinity of the contour.

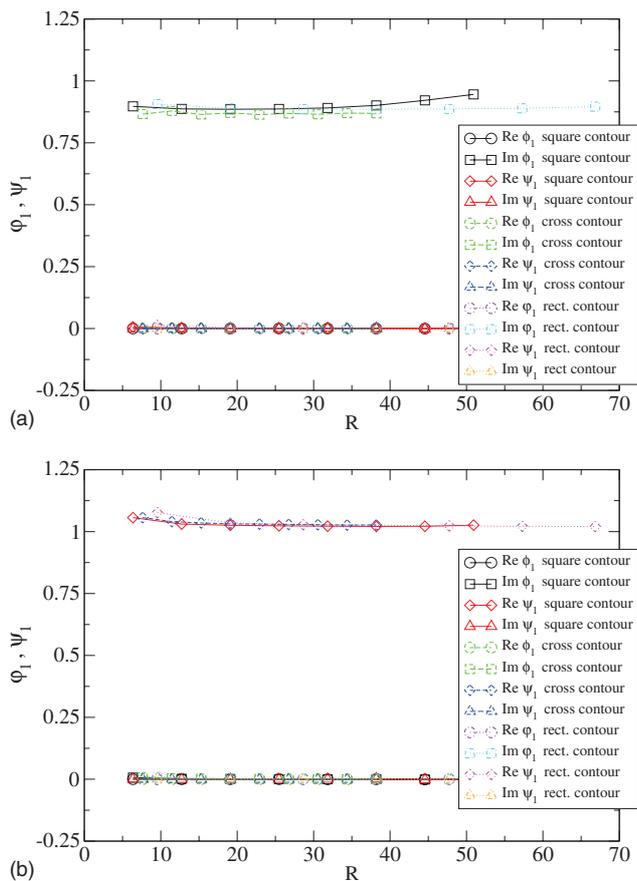


FIG. 2. (Color online) Normalized values of numerical estimates ϕ_1 and ψ_1 obtained for three families of contours, respectively square, cross, and rectangle shaped, and of varying length L in the case of a displacement field induced by the plastic shear strain (left) or contraction (right) experienced by the central element of a square lattice. Theoretical expectations are $\phi_1=i, \psi_1=0$ (left) and $\phi_1=0, \psi_1=1$ (right).

Finally we test the dependence of the numerical method on the material properties. In the determination of ϕ_1 and ψ_1 (17) as residues, the need to resort to a second-order derivative of the displacement field is balanced by the fact that the computation can be performed without any knowledge of the elastic properties of the material. The lack of dependence of the numerical procedure on the Young's modulus is trivially obtained due to the linearity of the finite-element method (FEM) computation. In Fig. 4 we show the dependence of the numerical results on the Poisson ratio. FEM computations have been performed on systems of size 100×100 with stress-free boundary conditions and a central inclusion experiencing a unit shear and a unit contraction, respectively. The Poisson ratio was varied from 0.05 to 0.45 by steps of 0.05. The results shown in the figure compare the numerical estimates obtained for a square contour of size 40 centered on the inclusion with the theoretical expectation $\psi_1 = \phi_1 = (1 + \nu)/2\pi$. The numerical results show that the volumetric strain is weakly dependent on the Poisson ratio, but the elementary shear is more poorly estimated for a high Poisson ratio.

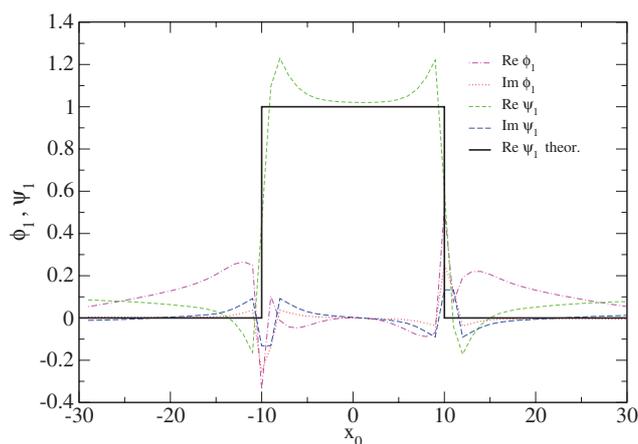


FIG. 3. (Color online) Normalized values of numerical estimates ϕ_1 obtained for square contours of center $(x_0, 0)$ and size $M=20$. The expected behavior of $\text{Re}\psi_1$ (unity when the inclusion lies within the contour, zero otherwise) is represented by the bold line. Other quantities are expected to be zero.

V. DISCUSSION AND CONCLUSION

The proposed approach is based on an exact result and hence theoretically establishes a parallel with other types of elastic singularities (in particular the stress intensity factors which characterize crack loadings) where similar path integrals are well known. When tested on direct numerical simulations, we could recover the main topological properties expected in this context: path independence and detection of the absence or presence of a singularity within the contour. However, the quantitative results proved more disappointing: the method is rather imprecise in the determination of the prefactor of the singularity and is more generally rather sensitive to noise. The main cause is presumably the inconsistent regularity of the displacement field solution (simple con-

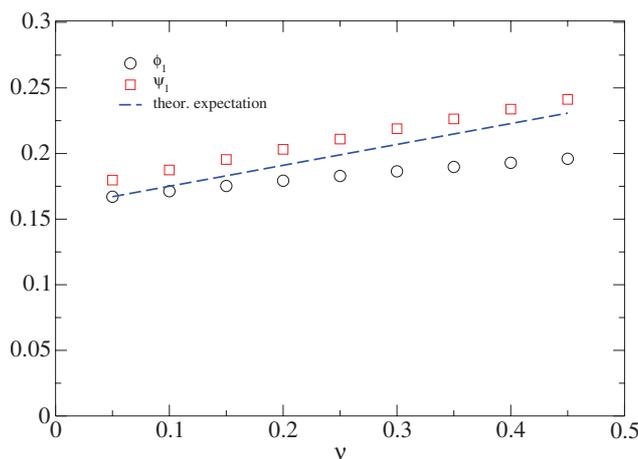


FIG. 4. (Color online) Numerical estimates of $|\phi_1|$ and ψ_1 obtained for a central inclusion experiencing a unit shear and a unit contraction, respectively, as a function of the Poisson ratio ν . The numerical results obtained in plane stress conditions for a system of size 100×100 with stress-free boundary conditions are compared with the theoretical expectation $(1 + \nu)/2\pi$.

tinuity) with the need to resort to estimates of first- and second-order differentials. A piecewise high-order polynomial interpolation is operational for integrals over finite segments; however, from one segment to the next, first- and second-order differentials will display a discontinuous character, which obviously affects the method and results. Moreover, being a path integral, the method does not take advantage of the knowledge of the displacement field at all points of a domain. To make the method more robust with respect to noise, different approaches can be followed. One natural way is to average the result over different contours, thus transforming the contour integral into a domain integral. An arbitrary weight average can also be considered, and hence one could optimize the weight in order to achieve the least

noise sensitivity. Such a method was explored successfully for cracks in Ref. [17]. Note finally that extensions to three dimensions obviously require a different technique from Kolossov-Muskhelishvili potentials and contour integrals; however, a linear extraction operator acting on the displacement field can still be computed to provide similarly the equivalent plastic strain.

ACKNOWLEDGMENTS

V.P. acknowledges the financial support of ANR program “PlastiGlass” Grant No. NT05-4_41640 and of the Academy of Finland.

-
- [1] V. V. Bulatov and A. S. Argon, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **2**, 167 (1994).
 - [2] V. V. Bulatov and A. S. Argon, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **2**, 185 (1994).
 - [3] V. V. Bulatov and A. S. Argon, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **2**, 203 (1994).
 - [4] M. L. Falk and J. S. Langer, *Phys. Rev. E* **57**, 7192 (1998).
 - [5] J.-C. Baret, D. Vandembroucq, and S. Roux, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 195506 (2002).
 - [6] G. Picard, A. Ajdari, F. Lequeux, and L. Bocquet, *Phys. Rev. E* **71**, 010501(R) (2005).
 - [7] A. Lemaître and C. Caroli, e-print arXiv:cond-mat/0609689v1.
 - [8] E. A. Jagla, *Phys. Rev. E* **76**, 046119 (2007).
 - [9] M. Zaiser and P. Moretti, *J. Stat. Mech. Theory Exp.* (2005) P08004.
 - [10] A. Tanguy, F. Leonforte, and J.-L. Barrat, *Eur. Phys. J. E* **20**, 355 (2006).
 - [11] C. E. Maloney and A. Lemaître, *Phys. Rev. E* **74**, 016118 (2006).
 - [12] J. Rice, *J. Appl. Mech.* **35**, 379 (1968).
 - [13] J. D. Eshelby, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **241**, 376 (1957).
 - [14] N. Muskhelishvili, *Some Basic Problems of the Mathematical Theory of Elasticity* (Noordhoff, Groningen, 1953).
 - [15] J. Réthoré, A. Gravouil, F. Morestin, and A. Combescure, *Int. J. Fract.* **132**, 65 (2005).
 - [16] S. Roux and F. Hild, *Int. J. Fract.* **140**, 141 (2006).
 - [17] J. Réthoré, S. Roux, and F. Hild, *Eng. Fract. Mech.* **75**, 3763 (2008).
 - [18] M. Jawson and R. Bhargava, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **57**, 669 (1961).
 - [19] J. Mathiesen, I. Procaccia, and I. Regev, *Phys. Rev. E* **77**, 026606 (2008).
 - [20] I. Goldhirsch and C. Goldenberg *Eur. Phys. J. E* **9**, 245 (2002).

Annexe B

Anisotropie structurelle induite par déformation dans un échantillon de verre de silice amorphe

La densité de la silice amorphe à pression ambiante dépend évidemment de l'histoire thermique de préparation, autrement dit, des taux de trempe utilisés pour préparer l'échantillon. À température ambiante, elle dépend aussi de l'historique des pressions maximales appliquées par la suite. Ce que nous qualifions de phénomène d'écrouissage en densité [83].

Les premières expériences datent des travaux de *T. Egami et coll.* [92] où ils ont pu observer, par diffraction des rayons X , une anisotropie structurelle induite par la plasticité dans des verres métalliques. Cette anisotropie structurelle a été, par la suite, confirmée par des simulations en dynamique moléculaire [93]. Des expériences plus récentes sur différents verres métalliques ont mis en évidence le même comportement [94, 95].

Nous nous basons ici sur des simulations en dynamique moléculaire avec des potentiels interatomiques à deux et à trois corps spécifiquement développés pour le verre de silice amorphe par *P. Vashishta et coll.* [96, 97]. Cette technique nous permet d'imposer une déformation en cisaillement le long d'une direction et à volume constant. Nous pouvons ainsi analyser l'évolution des paramètres internes et les effets résiduels. La densité ne suffit évidemment pas pour décrire la plasticité étant donnée sa dépendance à l'historique mécanique.

Pour la silice, chaque atome de silicium est enfermé dans un tétraèdre formé par quatre atomes d'oxygène et les tétraèdres sont liés entre eux par un atome d'oxygène commun. Afin d'étudier la topologie atomique au voisinage, il nous est possible de définir les fonctions de corrélation de paire (Si – O, Si – Si, O – O) et la distribution de la taille des anneaux de tétraèdre, par exemple. Toutefois, pour mieux capter l'orientation relative entre deux tétraèdres, nous nous servons du tenseur de texture (*fabric tensor*) \mathbf{F} , utilisé à l'origine pour les matériaux granulaires. Le tenseur de texture est défini par :

$$\mathbf{F} = \langle \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \rangle \quad , \quad (\text{B.1})$$

où \mathbf{n} représente le vecteur unitaire entre les deux atomes de silicium Si de chaque triplet Si – O – Si. Le tenseur de texture peut être caractérisé par ces valeurs propres $\lambda_{i=1,2,3}$ (où

$\sum_i \lambda_i = 1$). Pour un matériau isotrope, les trois valeurs propres de \mathbf{F} sont égales à $1/3$. En revanche, pour le cas des matériaux anisotropes, les valeurs propres sont différentes. Ce qui nous permet de définir un paramètre scalaire α tel que :

$$\alpha = \frac{3}{2} \sqrt{\sum_{i=1}^3 \left(\lambda_i - \frac{1}{3} \right)^2} , \quad (\text{B.2})$$

pour estimer l'anisotropie.

Après avoir préparé l'échantillon, le système est déformé puis relaxé, partant de différents niveaux de chargement. Nous présentons dans la publication mise en pièce jointe les mesures effectuées par tenseur de texture de l'anisotropie structurelle induite par l'écoulement plastique suite à une déformation en cisaillement d'un échantillon de verre de silice amorphe.

Ce travail a été effectué en collaboration avec *Cindy L. Rountree* et *Elisabeth Bouchaud* du laboratoire SPCSI (CEA-Saclay).

Plasticity-Induced Structural Anisotropy of Silica Glass

C. L. Rountree,¹ D. Vandembroucq,² M. Talamali,² E. Bouchaud,³ and S. Roux⁴

¹CEA, IRAMIS, SPCSI, Groupe Fracture et Systèmes Complexes, F-91191 Gif sur Yvette, France

²Laboratoire PMMH, UMR 7636 CNRS/ESPCI/Paris 6/Paris 7, 10 rue Vauquelin F-75231 Paris cedex 05, France

³CEA, IRAMIS, SPEC, Groupe Instabilités et Turbulence, F-91191 Gif sur Yvette, France

⁴LMT-Cachan, ENS de Cachan/CNRS-UMR 8535/Université Paris 6/PRES UniverSud Paris,

61 avenue du Président Wilson, F-94235 Cachan Cedex, France

(Received 21 December 2008; published 12 May 2009)

Amorphous silica density at ambient pressure is known to depend on thermal history (through the quenching rate) but also, at room temperature, on the maximum pressure applied in the past. Here we show that beyond density, a mechanical loading can endow the structure with an orientational order. Molecular dynamics simulations show evidence that amorphous silica develops a permanent anisotropic structure after extended shear plastic flow. This anisotropy which survives for an unstressed specimen is revealed markedly by the fabric tensor computed over the Si-O-Si orientations, albeit the SiO₄ tetrahedra microstructure remains mostly unaltered.

DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.195501

PACS numbers: 62.20.F-, 81.05.Kf

The plasticity of amorphous media, which can be easily evidenced via indentation or scratch tests [1], has a very different nature from its counterpart for crystalline media, since no elementary entities such as dislocations whose evolution controls plastic flow can be easily defined [2,3]. The current view is that spatially distributed local restructuring rather than extended defect motion (such as dislocation) is responsible for irreversible strains in amorphous materials [4,5]. At a very local scale, under load, a small group of atoms (called a transformation zone) may undergo rearrangements, a change of conformation eventually affecting the topology of the atomic bonds which will contribute to an elementary increment in irreversible strain. Although a complete description of these transformation zones is extremely complex, and cannot be cast into simple categories, a statistical analysis capturing the key properties of these zones is an attractive route for relating the macroscopic mechanical behavior to the underlying microstructural counterpart [4].

In contrast with dislocations which naturally lead to isochoric plastic deformation, transformation zones may densify or dilate as they rearrange. Indeed at a macroscopic scale, plasticity of silicate glasses is known to exhibit permanent densification [6,7] from a few percents for soda-lime glasses [8] to values as large as 20% in the extreme case of amorphous silica [9,10]. This densification naturally affects shear plasticity, and hence pressure and shear stress are to be coupled in the yield criterion of amorphous silica [11].

Plasticity of structural glasses is furthermore characterized by a significant hardening behavior [9,10]. The yield surface evolves with the mechanical loading. This means, in particular, that, when applying stress in a given direction (pure shear, pure hydrostatic pressure, etc.), the value of the elastic limit depends on the history of the loading.

To account for this dependence on mechanical history a proper description of plasticity thus requires the use of additional internal variables. The first one is obviously density, and indeed a recent study of densification with pressure allows one to characterize the density hardening of silica [10]. The necessity to include more internal variables than the mere density is a difficult question to address. Experimentally, plasticity of amorphous media calls for a high level of stress and confinement which can either be met in an indentation-type test (with the complication of the very strong spatial heterogeneity of the stress state) or in an anvil diamond cell where shear cannot be imposed. Thus it appears very difficult to follow a particular stress path which would allow one to answer this question. Hence, in the present study, we will resort to molecular dynamics simulations where homogeneous loadings with an arbitrary stress path can be imposed.

As for granular media plasticity, shear reversal experiments show that a simple scalar internal variable is not sufficient to account for the mechanical behavior, and a tensor-valued internal variable, characterizing the geometry packing, is needed [12]. For this purpose, a natural candidate is the so-called fabric tensor, $\mathbf{F} = \langle \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \rangle$, which captures the mean orientation of the contact normals, \mathbf{n} , through the spatial average of their dyadic product. This tensor characterizes an anisotropic texture of the medium. Experimental and numerical studies of granular media [13,14] have shown that such was the case after shearing. Indeed, more contacts are oriented along the direction(s) of compression. Similarly, the same tools have recently been used to study the rheology of foams [15].

The fabric tensor can be characterized by its three eigenvalues, λ_i , for $1 < i < 3$. The fact that \mathbf{n} is a unit vector implies that the trace of \mathbf{F} is equal to unity, or

$\sum_i \lambda_i = 1$ Thus, for an isotropic medium, the three eigenvalues are equal to $1/3$. In case of anisotropy, degeneracy is lifted and different eigenvalues λ_i are measured. In order to give a quantitative scalar estimate of this anisotropy, the following scalar α parameter, proportional to the norm of the deviatoric part of \mathbf{F} , is defined:

$$\alpha = \frac{3}{2} \sqrt{\sum_{i=1}^3 \left(\lambda_i - \frac{1}{3} \right)^2}. \quad (1)$$

For an isotropic medium, $\alpha = 0$, and the prefactor has been chosen such that in the case of full anisotropy, $\{\lambda_i\} = \{1; 0; 0\}$, we have $\alpha = 1$. This quantitative parameter, which is built in the same spirit as an effective shear stress, allows one to compare results obtained in different stress geometries. Pursuing our analogy, it is natural to consider a similar fabric tensor for amorphous silica. We will show that indeed, besides the usual (reversible) anisotropy induced by an elastic strain, plasticity induces a series of structural rearrangements which after unloading endow silica with a remnant anisotropic structure. The latter state can be regarded as a novel phase of amorphous silica.

In the case of silica, chemistry imposes that each silicon atom is encaged in a tetrahedron of four oxygen atoms forming a SiO_4 elementary unit. These tetrahedra are bounded to each other through a common oxygen atom. They are extremely robust and remain virtually unaltered under mechanical loadings. However, pairs of tetrahedra have much more freedom in their relative orientations. Henceforth, it is natural to build the equivalent of a fabric tensor from the “contacts” between neighboring tetrahedra. Thus for all Si-O-Si triplets, we consider the unit vector \mathbf{n} which connects all next to nearest neighbors [i.e., Si-Si atoms, see Fig. 2(a)]. The fabric tensor \mathbf{F} as defined above is built up by averaging over all next to nearest neighbor Si atoms. The fact that second neighbors are to be considered is a challenge to study this anisotropy experimentally using classical tools for structural analysis.

Amorphous silica was studied via molecular dynamics (MD) computer simulations. This technique allows us to impose an extended (simple) shear along one direction under constant volume, and reverse it. This particular stress path is able to reveal whether plasticity is accompanied by any structural change and, in particular, anisotropy. MD simulations are performed on amorphous silica ($a\text{-SiO}_2$), using the empirical interatomic potential developed by Vashishta *et al.* [16–18]. This potential incorporates steric repulsion, charge transfer, and electronic polarizability of atoms through pairwise interaction terms. Covalent effects in silica are included through bond bending and bond stretching three-body terms. The parameters of the potential have been adjusted by measurements of structural correlations, elastic moduli, and fracture toughness [16,19]. The $a\text{-SiO}_2$ samples were first prepared by melting (i.e., heating to 4000 K) 117912 (cubic box of length 12.088 nm) atoms of ideal β -cristobalite crystal. The sample was cooled to 2500 K at a rate of $1 \text{ K}/\Delta t$ (where

Δt is the time step) and allowed to relax for $60\,000\Delta t$ (large specimen). The cooling process was repeated at 1500 K, 600 K, 300 K, and 5 K. Afterwards a conjugate gradient method is used to cool the sample to 0 K. The temperature is once again elevated to 300 K in order to conduct simulations at room temperature. Periodic boundary conditions have been invoked in all simulations.

Shear plasticity of this model silica glass has been studied on 12 independent samples. Each sample was sheared by applying an external shear in small increments such that the volume was conserved (NVT ensemble). Between each subsequent shear the sample was allowed to relax. Also during the simulations the temperature was held fixed at 300 K using a thermostat. Two different shear strain rates have been used, 10^{-4} ps^{-1} and 10^{-2} ps^{-1} . It is to be stressed that these shear rates are considerably higher than the highest ones that may be considered experimentally. However lower shear rates cannot conceivably be imposed within the present framework of molecular dynamics. Therefore the effect of long time relaxation processes such as atom diffusion is out of reach of the present study.

Figure 1 depicts a typical stress strain curve. The initial behavior corresponds to linear elasticity; for the faster strain rate here represented, a stress overshoot is visible before a plateau corresponding to the stationary plastic regime. As discussed in [20], the amplitude of this stress overshoot is dependent on the strain rate and almost disappears for the slower rate. In addition to this monotonic test, unloading to zero shear stress has been performed starting from different values of the maximum total strain: 2.5%, 5%, 7.5%, 12.5%, 17.5%, and 25%. As can be seen in Fig. 1, beyond 5% strain (which corresponds to a shear

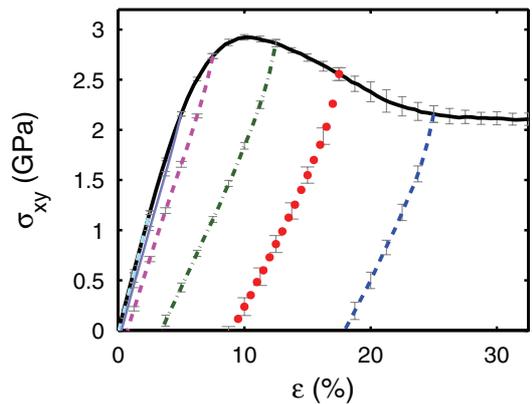


FIG. 1 (color online). The evolution of the average stress of 12 independent samples, composed of 117912 atoms each, when sheared: (1) from 0% to 30% [black solid line], unloaded (2) from +2.5% [light gray (sky blue) dash-dotted line], (3) from +5% [gray (lavender) solid line], (4) from +7.5% [light gray (pink) dashed line], (5) from +12.5% [dark gray (green) dash-dotted line], (6) from +17.5% [red dotted line], and (7) from +25% [dark gray (blue) dash-dotted line]. (Note: the deformation rate is 10^{-2} per ps.)

stress of about 2.25 GPa), permanent plastic deformation sets in. During the simulations the pressure was monitored, and it was found to increase from ~ 0 GPa during the elastic loading stage up to ~ 2.5 GPa during plastic flow. Further details can be found in [21].

In Fig. 2 the evolution of the eigenvalues of the fabric tensor is shown along shear loading and unloading from various values of total strain. At rest, isotropy of the glass is almost perfectly obtained; the three eigenvalues are equal within a precision of 10^{-3} . Shear loading then induces first an elastic strain which renders the medium anisotropic. The elastic shear strain naturally leads to the lifting of the degeneracy: the eigenvalues take different values with a growing shift. In the elastic regime, a change in fabric tensor can be shown to be proportional to the strain. Note that we recover here more or less the behavior of the shear stress: a linear regime related to elasticity followed by a

bump and a stationary elastoplastic regime. In this regime, the shear-induced anisotropy is marked and eigenvalues are clearly separated. In this plastic flow regime, where the elastic strain remains invariant, so does the fabric tensor. When unloading, the fabric tensor eigenvalues linearly return to their original value showing that the initial rise of anisotropy is perfectly reversible, and hence of elastic nature.

For $\varepsilon_{\max} = 2.5\%$ and 5% , isotropy is approximately obtained at zero deformation; the glass has recovered its original state. However, unloading from larger deformations $\varepsilon_{\max} = 7.5\%$, 12.5% , 17.5% , and 25% we observe that isotropy is never fully recovered. The beginning of the unloading stage shows a linear evolution somewhat comparable to the first elastic loading, consistent with the fact that the incremental strain during unloading is expected to be purely elastic. It is however noteworthy that a significant plastic strain occurs during this unloading phase showing a strong kinematic hardening, and a very severe shrinkage of the elastic domain. The permanent plastic shear deformation obtained at zero shear stress can be associated to the minimal gap between the eigenvalues of the fabric tensor, but this gap is clearly growing well beyond the numerical uncertainty.

The same analysis can be performed in a more quantitative manner by following the evolution of the scalar anisotropy index α under these shear loading and unloading tests and is presented in Fig. 3. The anisotropy index decreases under unloading, reaches a minimum value, α_{\min} , approximately when the shear stress is null. If the load is reversed to negative values, α rises again to saturate at a similar level as for direct shear. For a maximum deformation $\varepsilon_{\max} = 2.5\%$, 5% , we recover after unloading $\alpha_{\min} \approx 10^{-3}$: no change is noticeable when compared with the original state. For larger deformations, however, a clear

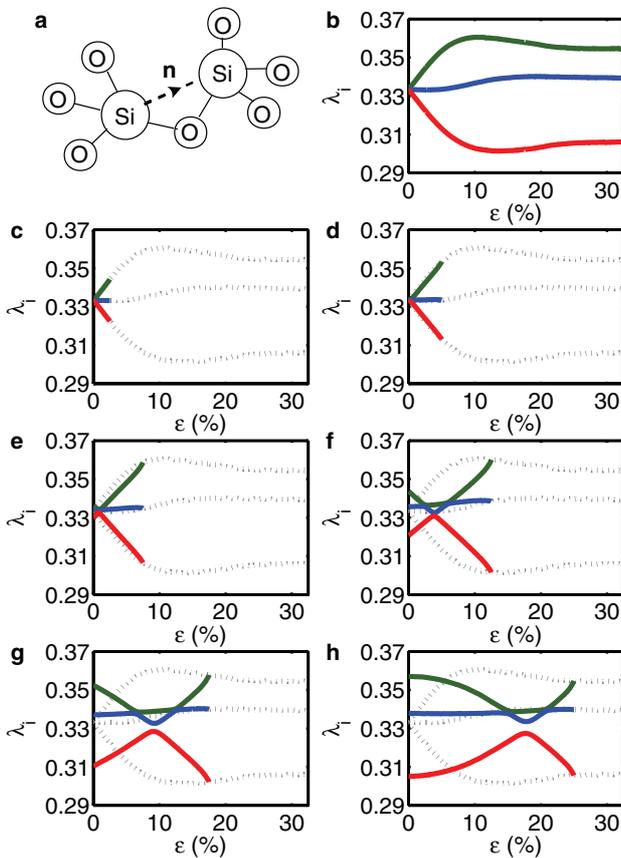


FIG. 2 (color online). (a) Sketch of the “contacts” Si-Si between neighboring SiO_4 tetrahedra used to build the fabric tensor $F = \langle \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \rangle$. Evolution of the eigenvalues of the fabric tensor when sheared from 0% to 30% (b) and unloaded from 2.5% (c), 5% (d), 7.5% (e), 12.5% (f), 17.5% (g), and 25% (h). Before loading the material is isotropic; the 3 eigenvalues should be equal within the errors bars. Upon loading (b), degeneracy is lifted and anisotropy first increases reversibly (c, d) due to the elastic strain. Then plasticity sets in (e–g), and after unloading, the material is left with a remnant structural anisotropy.

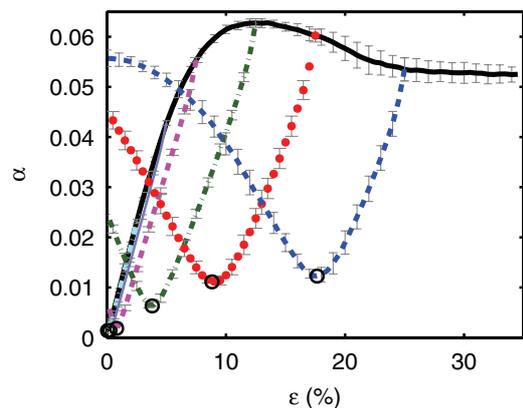


FIG. 3 (color online). Evolution of the anisotropy index α under shear loading and unloading (same as above). The minimum value of α , black circles, is associated with the state of the structure under zero shear stress. Permanent deformation is characterized by a nonzero value of the anisotropy index: the glass structure has become anisotropic.

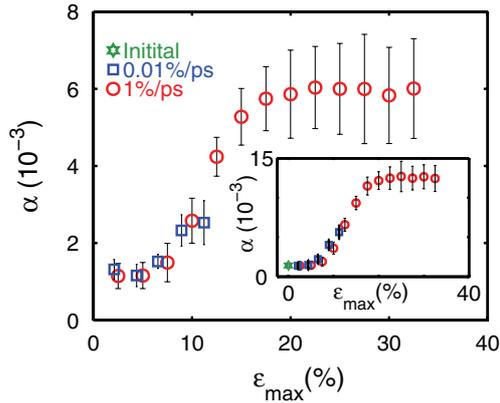


FIG. 4 (color online). Anisotropy parameter after unloading α_{\min} vs maximum strain ϵ_{\max} for two different imposed strain rates 10^{-2} ps^{-1} (red circles) and 10^{-4} ps^{-1} (blue squares). After shear unloading, normal stresses persist due to the plane deformation geometry and amplify the structural anisotropy (see insert). After relaxation of these stresses with an additional *NPT* step of 20 ps, a stress free state is obtained, while the silica structure still exhibits a significant anisotropy index.

increase of α_{\min} is observed up to values close to 10^{-2} , well above the numerical uncertainty.

These results are summarized in Fig. 4, which shows the evolution of the minimum gap, α_{\min} , versus the maximum deformation, ϵ_{\max} . The results obtained with a much slower strain rate 10^{-4} ps^{-1} , (one hundred times slower than the previous case) are also shown in the same figure. It is remarkable that both curves almost superimpose each other. Once silica has experienced shear plasticity, a significant anisotropy persists even after unloading. Note that an additional relaxation towards zero stress state (*NPT* ensemble) during 20 ps after unloading was performed. This ensures the elimination of normal stresses due to the shearing in plane deformation. As shown in the insert, the normal stresses naturally induce an additional anisotropy of trivial elastic origin which has to be eliminated before attesting for the presence of the plasticity-induced anisotropy discussed in the present study.

On the basis of molecular dynamics study of plasticity of amorphous silica under simple shear, a nonreversible anisotropy sets in and appears stable (at the time scale of MD). Detailed structure investigation could not reveal any significant deviation from the amorphous structure based on, e.g., interatomic distances. The eigenvectors of these Si-O-Si directions are aligned with the principal strain or stress directions. Because of the relatively short time scale naturally associated with MD simulations, an experimental validation of this observation is needed to validate our conclusions, in particular, concerning the stability of this phase. Experimentally, anisotropy is expected to give rise to birefringence, a property which might be more easily accessible than structural analyses. Using standard photoelasticity parameters for silica and the maximum anisotropy

obtained in the present work $\alpha = 5 \times 10^{-3}$, a crude estimate of the birefringence gives an index contrast $\Delta n = 10^{-3}$. Such a phenomenon may for instance be tested in the framework of rotational anvil cell experiments [22,23].

We acknowledge D. Bonamy, R. Kalia, and L. Van Brutzel. C.L.R. wishes to acknowledge the National Science Foundation Graduate Research program under Grant No. 0401467 for financial support. D.V., S.R., and M.T. acknowledge the financial support of ANR Grant "Plastiglass" No. ANR-05-BLAN-0367-01.

- [1] E. W. Taylor, *Nature (London)* **163**, 323 (1949).
- [2] F. Spaepen, *Acta Metall.* **25**, 407 (1977).
- [3] A. S. Argon, *Acta Metall.* **27**, 47 (1979).
- [4] M. L. Falk and J. S. Langer, *Phys. Rev. E* **57**, 7192 (1998).
- [5] V. V. Bulatov and A. S. Argon, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **2**, 167 (1994).
- [6] H. M. Cohen and R. Roy, *Phys. Chem. Glasses* **6**, 149 (1965).
- [7] F. M. Ernsberger, *J. Am. Ceram. Soc.* **51**, 545 (1968).
- [8] H. Ji, V. Keryvin, T. Rouxel, and T. Hammouda, *Scr. Mater.* **55**, 1159 (2006).
- [9] A. Perriot, V. Martinez, C. Martinet, B. Champagnon, D. Vandembroucq, and E. Barthel, *J. Am. Ceram. Soc.* **89**, 596 (2006).
- [10] D. Vandembroucq, T. Deschamps, C. Coussa, E. B. A. Perriot, B. Champagnon, and C. Martinet, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 485 221 (2008).
- [11] G. Kermouche, E. Barthel, D. Vandembroucq, and P. Dubujet, *Acta Mater.* **56**, 3222 (2008).
- [12] F. Radjai and S. Roux, *The Physics of Granular Media* (Wiley, Berlin, 2004), p. 165.
- [13] M. Oda, *Mech. Mater.* **16**, 35 (1993).
- [14] L. Rothenburg and N. P. Kruyt, *Int. J. Solids Struct.* **41**, 5763 (2004).
- [15] F. Graner, B. Dollet, C. Raufaste, and P. Marmottant, *Eur. Phys. J. E* **25**, 349 (2008).
- [16] P. Vashishta, R. K. Kalia, J. P. Rino, and I. Ebbsjö, *Phys. Rev. B* **41**, 12 197 (1990).
- [17] P. Vashishta, R. K. Kalia, A. Nakano, W. Li, and I. Ebbsjö, in *Amorphous Insulators and Semiconductors*, edited by M. F. Thorpe and M. I. Mitkova, NATO Science Partnership Sub-Series: 3 (Kluwer Academic, Dordrecht, The Netherlands, 1997), p. 151.
- [18] R. K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta, C. L. Rountree, L. V. Brutzel, and S. Ogata, *Int. J. Fract.* **121**, 71 (2003).
- [19] C. L. Rountree, R. K. Kalia, E. Lidorikis, A. Nakano, L. V. Brutzel, and P. Vashishta, *Annu. Rev. Mater. Res.* **32**, 377 (2002).
- [20] J. Rottler and M. O. Robbins, *Phys. Rev. E* **68**, 011507 (2003).
- [21] C. L. Rountree *et al.* (unpublished).
- [22] Y. Z. Ma, V. I. Levitas, and J. Hashemi, *J. Phys. Chem. Solids Suppl.* **67**, 2083 (2006).
- [23] Y. Z. Ma, E. Selvi, V. I. Levitas, and J. Hashemi, *J. Phys. Condens. Matter* **18**, S1075 (2006).

Bibliographie

- [1] E.W. Taylor. Plastic deformation of optical glass. *Nature*, 163 :323, 1949.
 - [2] D.M. Marsh. Plastic flow in glass. *Proc. Roy. Soc. A*, 279 :420, 1964.
 - [3] E. Bruche and G. Schimmel. Proceedings of the third international conference on electron microscopy. *Royal Microscopical Soc., London*, page 517, 1954.
 - [4] P.W. Bridgman and I. Simon. Effect of very high pressures on glass. *J. Appl. Phys.*, 24 :405, 1953.
 - [5] J.D. Mackenzie. High-pressure effects on oxide glasses. *J. Am. Ceram. Soc.*, 46 :461, 1963.
 - [6] H.M. Cohen and R. Roy. Densification of glass at very high pressure. *Phys. Chem. Glasses*, 6 :149, 1965.
 - [7] F.M. Ernsberger. Role of densification in deformation of glasses under point loading. *J. Am. Ceram. Soc.*, 51 :545, 1968.
 - [8] K.W. Peter. Densification and flow phenomena of glass in indentation experiments. *J. Non-Cryst. Solids*, 5 :103, 1970.
 - [9] A.S. Argon. Plastic deformation in metallic glasses. *Acta Metall.*, 27 :47, 1979.
 - [10] F. Spaepen. A microscopic mechanism for steady-state inhomogeneous flow in metallic glasses. *Acta Metall.*, 25 :407, 1977.
 - [11] A.S. Argon. Inelastic deformation and fracture of glassy solids. *Material science and technology, VCH, Weinheim*, page 63, 1993.
 - [12] C.A. Schuh, T.C. Hufnagel, and U. Ramamurty. Mechanical behavior of amorphous alloys. *Acta Mat.*, 55 :4067–4109, 2007.
 - [13] V.V. Bulatov and A.S. Argon. A stochastic model for continuum elasto-plastic behavior. I. numerical approach and strain localization. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2 :167, 1994.
 - [14] V.V. Bulatov and A.S. Argon. A stochastic model for continuum elasto-plastic behavior. II. a study of the glass transition and structural relaxation. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2 :185, 1994.
-

-
- [15] V.V. Bulatov and A.S. Argon. A stochastic model for continuum elasto-plastic behavior. III. plasticity in ordered versus disordered solids. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2 :203, 1994.
- [16] M.L. Falk and J.S. Langer. Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids. *Phys. Rev. E*, 57 :7192, 1998.
- [17] A. Tanguy, J.P. Wittmer, F. Leonforte, and J.-L. Barrat. Continuum limit of amorphous elastic bodies I : A finite-size study of low-frequency harmonic vibrations. *Phys. Rev. B*, 66 :174205, 2002.
- [18] F. Varnik, L. Bocquet, J.-L. Barrat, and L. Berthier. Shear localization in a model glass. *Phys. Rev. Lett.*, 90 :095702, 2003.
- [19] C.E. Maloney and A. Lemaître. Subextensive scaling in the athermal, quasistatic limit of amorphous matter in plastic shear flow. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :016001, 2004.
- [20] C.E. Maloney and A. Lemaître. Universal breakdown of elasticity at the onset of material failure. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :195501, 2004.
- [21] F. Leonforte, A. Tanguy, J.P. Wittmer, and J.-L. Barrat. Continuum limit of amorphous elastic bodies II : Linear response to a point source force. *Phys. Rev. B*, 70 :014203, 2004.
- [22] Y. Shi and M.L. Falk. Strain localization and percolation of stable structure in amorphous solids. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :095502, 2005.
- [23] F. Leonforte, R. Boissière, A. Tanguy, J.P. Wittmer, and J.-L. Barrat. Continuum limit of amorphous elastic bodies III : Three-dimensional systems. *Phys. Rev. B*, 72 :224206, 2005.
- [24] C.E. Maloney and A. Lemaître. Amorphous systems in athermal, quasistatic shear. *Phys. Rev. E*, 74 :016118, 2006.
- [25] A. Tanguy, F. Leonforte, and J.-L. Barrat. Plastic response of a 2d lennard-jones amorphous solid : detailed analysis of the local rearrangements at very slow strain rate. *Eur. Phys. J. E*, 20 :355, 2006.
- [26] Y. Shi, M.B. Katz, H. Li, and M.L. Falk. Evaluation of the disorder temperature and free-volume formalisms via simulations of shear banding in amorphous solids. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :185505, 2007.
- [27] C.E. Maloney and M.O. Robbins. Evolution of displacements and strains in sheared amorphous solids. *J. Phys. : Cond. Mat.*, 20 :244128, 2008.
- [28] M. Tsamados, A. Tanguy, F. Léonforte, and J.-L. Barrat. On the study of local-stress rearrangements during quasi-static plastic shear of a model glass : Do local-stress components contain enough information? *Eur. Phys. J. E*, 26 :283, 2008.
-

-
- [29] M. Tsamados, A. Tanguy, C. Goldenberg, and J.-L. Barrat. Local elasticity map and plasticity in a model lennard-jones glass. *Phys. Rev. E*, 80 :026112, 2009.
- [30] C.E. Maloney and M.O. Robbins. Anisotropic power law strain correlations in sheared amorphous 2d solids. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :225502, 2009.
- [31] A. Lemaître and C. Caroli. Rate-dependent avalanche size in athermally sheared amorphous solids. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :065501, 2009.
- [32] F. Varnik, L. Bocquet, and J.-L. Barrat. A study of the static yield stress in a binary lennard-jones glass. *J. Chem. Phys.*, 120 :2788, 2004.
- [33] Y. Shi and M.L. Falk. Atomic-scale simulations of strain localization in three-dimensional model amorphous solids. *Phys. Rev. B*, 73 :214201, 2006.
- [34] A.C. Lund and C.A. Schuh. Yield surface of a simulated metallic glass. *Acta Mat.*, 51 :5399, 2003.
- [35] M.J. Demkowicz and A.S. Argon. High-density liquidlike component facilitates plastic flow in a model amorphous silicon system. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :025505, 2004.
- [36] M.J. Demkowicz and A.S. Argon. Liquidlike atomic environments act as plasticity carriers in amorphous silicon. *Phys. Rev. B*, 72 :245205, 2005.
- [37] M.J. Demkowicz and A.S. Argon. Autocatalytic avalanches of unit inelastic shearing events are the mechanism of plastic deformation in amorphous silicon. *Phys. Rev. B*, 72 :245206, 2005.
- [38] M. Talati, T. Albaret, and A. Tanguy. Atomistic simulations of elastic and plastic properties in amorphous silicon. *Europhys. Lett.*, 86 :66005, 2009.
- [39] J. Rottler and M.O. Robbins. Yield conditions for deformation of amorphous polymer glasses. *Phys. Rev. E*, 64 :051801, 2001.
- [40] J. Rottler and M.O. Robbins. Shear yielding of amorphous glassy solids : Effect of temperature and strain rate. *Phys. Rev. E*, 68 :011507, 2003.
- [41] F. Leonforte, A. Tanguy, J.P. Wittmer, and J.-L. Barrat. Inhomogeneous elastic response of silica glass. *Phys. Rev. Lett.*, 97 :055501, 2006.
- [42] C.L. Rountree, D. Vandembroucq, M. Talamali, E. Bouchaud, and S. Roux. Plasticity-induced structural anisotropy of silica glass. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :195501, 2009.
- [43] D.L. Malandro and D.J. Lacks. Molecular-level mechanical instabilities and enhanced self-diffusion in flowing liquids. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :5576, 1998.
- [44] W. Jin, R.K. Kalia, P. Vashishta, and J.P. Rino. Structural transformation, intermediate-range order, and dynamical behavior of SiO₂ glass at high pressures. *Phys. Rev. Lett.*, 71 :3146, 1993.
-

-
- [45] W. Jin, R.K. Kalia, P. Vashishta, and J.P. Rino. Structural transformation in densified silica glass : a molecular-dynamics study. *Phys. Rev. B*, 50 :118, 1994.
- [46] D.J. Lacks. First-order amorphous-amorphous transformation in silica. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :4629, 2000.
- [47] L.P. Dávila, M.-J. Caturla, A. Kubota, B. Sadigh, T. Díaz de la Rubia, J.F. Shackelford, S.H. Risbud, and S.H. Garofalini. Transformations in the medium-range order of fused silica under high pressure. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :205501, 2003.
- [48] A. Rahmani, M. Benoit, and C. Benoit. Signature of small rings in the Raman spectra of normal and compressed amorphous silica : A combined classical and ab initio study. *Phys. Rev. B*, 68 :184202, 2003.
- [49] L. Huang and J. Kieffer. Amorphous-amorphous transitions in silica glass. 1. reversible transitions and thermomechanical anomalies. *Phys. Rev. B*, 69 :224203, 2004.
- [50] L. Huang and J. Kieffer. Amorphous-amorphous transitions in silica glass. 2. irreversible transitions and densification limit. *Phys. Rev. B*, 69 :224204, 2004.
- [51] Y. Liang, C.R. Miranda, and S. Scandolo. Mechanical strength and coordination defects in compressed silica glass : Molecular dynamics simulations. *Phys. Rev. B*, 75 :024205, 2007.
- [52] C. Goldenberg, A. Tanguy, and J.-L. Barrat. Particle displacements in the elastic deformation of amorphous materials : Local fluctuations vs. non-affine field. *Europhys. Lett.*, 80 :16003, 2007.
- [53] I. Goldhirsch and C. Goldenberg. On the microscopic foundations of elasticity. *Eur. Phys. J. E*, 9 :245, 2002.
- [54] F. Delogu. Identification and characterization of potential shear transformation zones in metallic glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :255901, 2008.
- [55] D. Rodney and C. Schuh. Distribution of thermally activated plastic events in a flowing glass. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :235503, 2009.
- [56] J.-C. Baret, D. Vandembroucq, and S. Roux. Extremal model for amorphous media plasticity. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :195506, 2002.
- [57] G. Picard, A. Ajdari, F. Lequeux, and L. Bocquet. Slow flows of yield stress fluids : complex spatio-temporal behaviour within a simple elasto-plastic model. *Phys. Rev. E*, 71 :010501(R), 2005.
- [58] A. Lemaître and C. Caroli. Dynamical noise and avalanches in quasi-static plastic flow of amorphous solids. *arXiv :cond-mat/0609689v1*, 2006.
- [59] A. Lemaître and C. Caroli. Plastic response of a 2d amorphous solid to quasi-static shear : II - dynamical noise and avalanches in a mean field model. *arXiv :cond-mat/0705.3122*, 2007.
-

-
- [60] E.A. Jagla. Strain localization driven by structural relaxation in sheared amorphous solids. *Phys. Rev. E*, 76 :046119, 2007.
- [61] E.A. Jagla. Finite width of quasistatic shear bands. *Phys. Rev. E*, 78 :026105, 2008.
- [62] M. Zaiser and P. Moretti. Fluctuation phenomena in crystal plasticity - a continuum model. *J. Stat. Mech.*, 2005(08) :P08004, 2005.
- [63] O. Takeshi and K. Sekimoto. Internal stress in a model elastoplastic fluid. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :108301, 2005.
- [64] E.R. Homer and C.A. Schuh. Mesoscale modeling of amorphous metals by shear transformation zone dynamics. *Acta Mat.*, 57 :2823, 2009.
- [65] H.J. Herrmann and S. Roux. *Statistical models for the fracture of disordered media*. North-Holland, Amsterdam, 1990.
- [66] J.M. Carlson and A.A. Batista. Constitutive relation for the friction between lubricated surfaces. *Phys. Rev. E*, 53 :4153, 1996.
- [67] T. Baumberger and C. Caroli. Solid friction from stick-slip down to pinning and aging. *Adv. Phys.*, 55 :279, 2006.
- [68] Y. Ben-Zion and J.R. Rice. Earthquake failure sequences along a cellular fault zone in a three-dimensional elastic solid containing asperity and nonasperity regions. *J. Geophys. Res.*, 98 :14109, 1993.
- [69] J.R. Rice. Spatio-temporal complexity of slip on a fault. *J. Geophys. Res.*, 98 :9885, 1993.
- [70] J.M. Carlson, J.S. Langer, and B.E. Shaw. Dynamics of earthquake faults. *Rev. Mod. Phys.*, 66 :657, 1994.
- [71] H.M. Jaeger, S.R. Nagel, and R.P. Behringer. Granular solids, liquids, and gases. *Rev. Mod. Phys.*, 68 :1259, 1996.
- [72] P. Sollich, F. Lequeux, P. Hébraud, and M.E. Cates. Rheology of soft glassy materials. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :2020, 1997.
- [73] E. Rolley, C. Guthmann, R. Gombrowicz, and V. Repain. Roughness of the contact line on a disordered substrate. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :2865, 1998.
- [74] S. Moulinet, C. Guthmann, and E. Rolley. Roughness and dynamics of a contact line of a viscous fluid on a disordered substrate. *Eur. Phys. J. E*, 8 :437, 2002.
- [75] J. Schmittbuhl, S. Roux, J.-P. Vilotte, and K.J. Måløy. Interfacial crack pinning : effect of nonlocal interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 74 :1787, 1995.
- [76] J. Schmittbuhl and K.J. Måløy. Direct observation of a self-affine crack propagation. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :3888, 1997.
-

-
- [77] S. Ramanathan and D.S. Fisher. Onset of propagation of planar cracks in heterogeneous media. *Phys. Rev. B*, 58 :6026, 1998.
- [78] J.D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. Roy. Soc. A*, 241 :376, 1957.
- [79] N. Muskhelishvili. *Some basic problems of the mathematical theory of elasticity*. Noordhoff, Groningen, 1953.
- [80] M. Talamali, V. Petäjä, D. Vandembroucq, and S. Roux. Path-independent integrals to identify localized plastic events in two dimensions. *Phys. Rev. E*, 78 :016109, 2008.
- [81] A. Perriot. *Nanoindentation de couches minces déposées sur substrat de verre de silice*. PhD thesis, Univ. Pierre et Marie Curie, Paris, 2005.
- [82] A. Perriot, V. Martinez, C. Martinet, B. Champagnon, D. Vandembroucq, and E. Barthel. Raman micro-spectroscopic map of plastic strain in indented amorphous silica. *J. Am. Ceram. Soc.*, 89 :596, 2006.
- [83] D. Vandembroucq, T. Deschamps, C. Coussa, A. Perriot, E. Barthel, B. Champagnon, and C. Martinet. Density hardening plasticity and mechanical ageing of silica glass under pressure : a Raman spectroscopic study. *J. Phys. : Condens. Matter*, 20 :485221, 2008.
- [84] I.N. Sneddon. *Fourier Transforms*. McGraw-Hill, New York, 1951.
- [85] G. Picard, A. Ajdari, F. Lequeux, and L. Bocquet. Elastic consequences of a single plastic event : A step towards the microscopic modeling of the flow of yield stress fluids. *Eur. Phys. J. E*, 15 :371, 2004.
- [86] N.P. Bailey, J. Schiotz, and K.W. Jacobsen. Atomistic simulation study of the shear-band deformation mechanism in Mg-Cu metallic glasses. *Phys. Rev. B*, 73 :064108, 2006.
- [87] A. Tanguy, M. Gounelle, and S. Roux. From individual to collective pinning : effect of long-range elastic interactions. *Phys. Rev. E*, 58 :1577, 1998.
- [88] M. Paczuski, S. Maslov, and P. Bak. Avalanche dynamics in evolution, growth, and depinning models. *Phys. Rev. E*, 53 :414, 1996.
- [89] M. Zaiser and N. Nikitas. Slip avalanches in crystal plasticity : scaling of the avalanche cut-off. *J. Stat. Mech.*, 2007(04) :P04013, 2007.
- [90] D. Vandembroucq, R. Skoe, and S. Roux. Universal depinning force fluctuations of an elastic line : Application to finite temperature behavior. *Phys. Rev. E*, 70 :051101, 2004.
- [91] J.R. Rice. A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks. *J. Appl. Mech.*, 35 :379, 1968.
-

-
- [92] Y. Suzuki, J. Haimovich, and T. Egami. Bond-orientational anisotropy in metallic glasses observed by x-ray diffraction. *Phys. Rev. B*, 35 :2162, 1987.
- [93] T. Tomida and T. Egami. Molecular-dynamics study of structural anisotropy and anelasticity in metallic glasses. *Phys. Rev. B*, 48 :3048, 1993.
- [94] W. Dmowski and T. Egami. Structural anisotropy in metallic glasses induced by mechanical deformation. *Adv. Eng. Mat.*, 10 :1003, 2008.
- [95] Á. Révész, E. Schaffer, and Z. Kovács. Structural anisotropy in a $Zr_{57}Ti_5Cu_{20}Al_{10}Ni_8$ bulk metallic glass deformed by high pressure torsion at room temperature. *Appl. Phys. Lett.*, 92 :011910, 2008.
- [96] P. Vashishta, R.K. Kalia, J.P. Rino, and I. Ebbsjö. Interaction potential for SiO_2 : A molecular-dynamics study of structural correlations. *Phys. Rev. B*, 41 :12197, 1990.
- [97] R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta, C.L. Rountree, L. Van Brutzel, and S. Ogata. Multiresolution atomistic simulations of dynamic fracture in nanostructured ceramics and glasses. *Int. J. Frac.*, 121 :71, 2003.
-

Plasticité des matériaux amorphes : étude et développement d'un modèle statistique.

Résumé - En raison de l'absence d'ordre à longue portée, la déformation plastique dans les matériaux amorphes ou désordonnés ne peut être expliquée en termes de dislocations. Une hypothèse commune consiste à décrire la déformation plastique macroscopique comme une succession de réorganisations localisées à une échelle microscopique. Les détails de tels réarrangements locaux dépendent évidemment de la structure précise du matériau étudié. Au-delà du changement local de la structure, ces réarrangements locaux induisent des contraintes élastiques internes dans le matériau. Encore une fois, les détails de ces interactions élastiques dépendent des réarrangements locaux qui ont lieu. Cependant, ces contraintes peuvent être développées sur un développement multipolaire. Deux termes dominants peuvent être extraits, correspondant à un cisaillement pur et une dilatation d'une inclusion sphérique. Ces deux termes sont caractérisés par un comportement de singularités avec des symétries différentes. Un événement de cisaillement pur induit une symétrie quadripolaire tandis qu'un événement volumétrique induit une symétrie dipolaire. Nous développons un modèle mésoscopique de la plasticité des amorphes, défini à travers un seuil local de plasticité aléatoire et une redistribution des contraintes élastiques quadripolaire, correspondant à l'effet d'un cisaillement plastique local d'une inclusion entourée par une matrice élastique. Malgré sa simplicité, ce modèle permet de rendre compte des récentes observations expérimentales et numériques sur la plasticité des matériaux amorphes. Des simulations numériques de ce modèle simple, appartenant à la famille des modèles de *pinning*, nous permettent ainsi de mettre en évidence un comportement d'érouissage, auquel nous donnons une interprétation purement statistique, et de retrouver un effet de localisation de la déformation plastique. Cette localisation non persistante obéit à une symétrie quadripolaire, la même symétrie que la fonction de redistribution des contraintes élastiques. En outre, nous montrons que les corrélations des déformations plastiques obéissent à une loi d'échelle anisotrope et nous donnons les premières estimations des exposants critiques caractérisant ce modèle.

Mots-clés - Plasticité ; Matériaux Amorphes ; Modèle Mésoscopique ; Modèle *Pinning*

Plasticity of amorphous materials : study and development of a statistical model.

Abstract - Because of the lack of long-range order, plastic deformation in amorphous and disordered materials cannot be explained in terms of dislocations. A common assumption thus consists of describing the macroscopic plastic deformation as deriving from a succession of localized reorganizations at some microscopic scale. The details of such local rearrangements depend obviously on the precise structure of the material under study. Beyond the local change of structure, such local rearrangements induce internal elastic stresses throughout the material. Again, the details of these elastic interactions depend on the local rearrangements that take place. However, these stresses can be developed on a multipole expansion and two dominant terms can be extracted, corresponding to pure shear and dilation of a spherical cavity. These two terms are characterized by a similar singular behavior but their symmetries are different. A pure shear event induces quadrupolar symmetry while a volumetric event induces dipolar symmetry. We develop a mesoscopic model of amorphous plasticity, defined through the data of a local random plastic threshold and a quadrupolar elastic stress redistribution corresponding to the effect of a local plastic shear in a small inclusion surrounded by an elastic matrix. This model in spite of its simplicity reports the recent experimental and numerical observations on the plasticity of amorphous materials. Numerical simulations of this simple model belonging to the family of pinning models allow us to evidence a hardening behavior, with purely a statistical interpretation, and a localization effect of the plastic deformation. This nonpersistent localization obeys to the same quadrupolar symmetry as the elastic stress redistribution function. In addition, we show that the correlations of plastic deformations obey to anisotropic scaling law and we give first estimates of the critical exponents characterizing this model.

Keywords - Plasticity ; Amorphous Materials ; Mesoscopic Model ; Pinning Model
