HAL
open science

Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins

Fabrice Barbe

To cite this version:

Fabrice Barbe. Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins. Mécanique [physics.med-ph]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2000. Français. NNT : . tel-00005640

HAL Id: tel-00005640

https://pastel.hal.science/tel-00005640v1

Submitted on 5 Apr 2004

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.

ECOLE DES MINES
DE PARIS

Collège doctoral

N° attribué par la bibliothèque
|__|__|__|__|__|__|__|__|__|__|

THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur de L'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris

Spécialité : "Sciences et Génie des Matériaux"

présentée et soutenue par

Fabrice Barbe

le 22 décembre 2000

Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins

Directeurs de thèse : M.M. S. Forest et G. Cailletaud

Jury :

M. O. Débordes	ESM2
M. P. Pilvin	Ecole Centrale Paris
M. M. Berveiller	Université de Metz
M. J. Ruste	EDF-DER
M. J. Mendez	ENSMA
M. J.-L. Chaboche	ONERA

Centre des Matériaux P.M. Fourt de l'Ecole des Mines de Paris,
BP 87, 91003 Evry CEDEX

Abstract

This work results from the preliminary development of laws and tools for the numerical modeling of the elastoviscoplastic behavior of crystalline material: *(i)* constitutive laws for single crystals, *(ii)* transition rules for homogenization methods, *(iii)* a finite element code with parallel computing abilities and *(iv)* a generator of 3D polycrystalline microstructures. Having these tools in hands, we have performed a study of the behavior of 3D polycrystals under small strains, on the macroscopic, intergranular and intragranular scales.

The polycrystalline medium is described by maps of Voronoïpolyhedra given in the form of voxel files (L. Decker, D. Jeulin, ENSMP). So we can have use of as much 3D maps of polycrystals as we need. With the implementation of the FETI method into the FE code ZeBuLoN (F. Feyel, S. Quilici, ENSMP-ONERA), we can resort to parallel computing and solve problems with huge amount of degrees of freedom. With the discretization obtained, we can describe intragranular fields inside 3D polycrystals.

In the first part of the study, we have analysed how the results were sensitive to the input data of the modeling (number of elements, number of grains, microstructural realization ...). From this we could deduce an affordable computing configuration for the simulation of a Representative Volume Element of isotropic polycrystal. In the second part, attention has been focused on the inter- and intragranular heterogeneity predicted with FE, by comparison to that of a self-consistent model. To complete, we have studied the influence of grain boundaries and of the boundary conditions on the response of a tensile test, on the different scales of the modeling. We have thus characterized a local and a mean effect of the boundaries as a function of the distance to the boundaries under concern -either grain boundaries or the contour. Finally we present results of tensile test simulations performed in the framework of non-local mechanics of Cosserat media (S. Forest, ENSMP): as a microstructural characteristic length has been introduced, the modeling provides information on the effective grain size effect in polycrystals.

Résumé

Cette étude a été effectuée à la suite du développement de lois et d'outils applicables à la modélisation numérique du comportement élastoviscoplastique de matériaux cristallins : des lois de comportement de monocristaux, des lois de transition d'échelle pour les modèles d'homogénéisation, un code de calcul Eléments Finis adapté au calcul parallèle et un programme de génération de microstructures polycristallines 3D. Disposant de ces éléments, nous avons étudié le comportement de polycristaux 3D en petites déformations, aux échelles macroscopique, intergranulaire et intragranulaire.

Le milieu polycristallin est décrit par des polyèdres de Voronoï, donnés sous la forme d'un fichier de voxels (L. Decker, D. Jeulin, ENSMP). L'implémentation de la méthode FETI dans le code EF ZéBuLoN (F. Feyel, S. Quilici, ENSMP-ONERA) permet la résolution en parallèle de problèmes à très grand nombre de degrés de liberté. Ainsi nous avons accès à un nombre illimité de réalisations de microstructures et nous pouvons faire figurer suffisamment d'éléments dans un maillage pour que soit possible la description des champs intragranulaires dans un polycristal 3D.

Pour commencer nous montrons les spécificités de notre approche par rapport aux travaux de modélisation de la plasticité cristalline. La première partie de l'exploitation des outils a consisté à analyser la sensibilité des résultats aux données de la modélisation (nombre d'éléments, nombre de grains, réalisation de microstructure . . .) afin d'établir une configuration de calcul valable pour des simulations sur un Volume Elémentaire Représentatif de polycristal isotrope. En seconde partie nous mettons en évidence l'hétérogénéité de comportement inter- et intragranulaire et l'apport de la méthode par rapport à une démarche autocohérente. Ceci est complété par une analyse de l'influence des joints de grain et des conditions aux limites sur la réponse d'un essai en traction simple, aux différentes échelles de la modélisation. Nous caractérisons ainsi un effet local et un effet moyen pour tous les grains, en fonction de la distance à un joint ou à un bord. En annexe sont donnés les résultats de simulations obtenus avec un modèle non-local des milieux de Cosserat (S. Forest, ENSMP) qui ont permis de quantifier un effet de taille de grain sur le comportement effectif de polycristaux.

Remerciements

Ce travail a été réalisé au Centre des Matériaux sous la direction de Georges Cailletaud et Samuel Forest. Je tiens à leur exprimer ma gratitude pour la confiance, la patience et l'intérêt qu'ils m'ont témoignés. Quoi qu'il ait pu en paraître, l'enthousiasme et le dynamisme qu'ils communiquent au sein de l'equipe CoCaS ont été pour moi des facteurs essentiels de motivation et d'engagement. J'ai conscience d'avoir eu la chance de travailler auprès de personnes exceptionnelles -pas seulement sur le plan scientifique. Merci donc de me l'avoir accordée.

Ma reconnaissance va aussi à Marcel Berveiller, Philippe Pilvin, Olivier Débordes, Jacky Ruste, José Mendez et Jean-Louis Chaboche qui m'ont fait l'honneur de participer au jury de cette thèse et de porter une attention avisée sur mon travail.

Je remercie très sincèrement Frédéric Feyel, Ron Foerch et Jacques Besson pour leurs contributions préalables à ce travail, ainsi qu'Odile Adam, Rodrigue Assard, Valérie Mounoury, Grégory Sainte Luce, Françoise Di Rienzo, Jean-Marc Cardona, Eric Nicouleau, Toufik Kanit, Olivier Diard, Isabelle Galliet, Stéphane Bugat pour les aides de multiples formes qu'ils m'ont apportées.

J'adresse en particulier mes remerciements à Stéphane Quilici pour toute la patience et la compréhension dont il a fait preuve pour me guider dans l'utilisation des outils numériques.

En outre, sans l'accord et la confiance de Jean Pierre Trottier, Directeur du Centre des Matériaux, et sans la coopération salutaire du personnel administratif, ce travail n'aurait pu être mené à son terme. Je leur en suis très reconnaissant.

Table des matières

Introduction **ix**

I Revue bibliographique **1**
I.1 Modèles phénoménologiques et modèles à champs moyens 1
I.2 Modèles Eléments Finis 6
I.2.1 Description régulière des grains 6
I.2.2 Description détaillée de chaque grain 7
I.3 Aspects expérimentaux, structures de dislocations, effets d'échelle 8

III Méthode, modèle, outils **11**
II.1 Introduction 13
II.2 Polycrystal generation 15
II.2.1 Models of random polycrystals 15
II.2.2 Construction of Voronoï polyhedra on a grid of points 16
II.2.3 Extensions of the model and results 17
II.3 Model for the Single- and Polycrystal 19
II.3.1 Single Crystal 19
II.3.2 Transition rules for the polycrystal 20
II.4 Numerical implementation 22
II.4.1 Integration of the constitutive equations 22
II.4.2 Parallel computation 23
II.4.3 Representation of the RVE 24
II.5 Validation of the numerical model 25
II.5.1 Construction of the aggregate 25
II.5.2 Influence of the geometry and of the texture 27
II.5.3 Influence of the element interpolation 27
II.5.4 Influence of the size of the mesh 31
II.5.5 Comparaison de la réponse EF avec la réponse homogénéisée d'un milieu biphasé élastique 32
II.5.6 Influence du nombre d'éléments sur la réponse effective d'un milieu biphasé élastique 32
II.5.7 Influence du nombre d'éléments et de grains sur la réponse effective en élasticité hétérogène 32
II.5.8 Influence du nombre d'éléments sur la réponse moyenne par grain . . . 36
II.5.9 Influence du nombre d'éléments sur la réponse locale 38
II.5.10 Local comparison with the self–consistent model 40
II.6 Conclusion 40
II.7 Résumé des possibilités offertes par la méthode et les modèles 41

III Résultats aux différentes échelles **43**
III.1 Introduction 45
III.2 Conditions of the calculations 46
III.3 Results 47
III.3.1 Global scale 47
III.3.2 Phase scale 48
III.3.3 Intragranular level 51
III.4 The free surface effect 56
III.4.1 Phase scale 56
III.4.2 Analysis in planes parallel to a free surface 57
III.4.3 Analysis in particular grains 59
III.4.4 Analysis on a line perpendicular to the free surface 59
III.4.5 Analysis on contour plots 60
III.5 Conclusion 62
III.6 Complément de résultats à l'échelle macroscopique 63
III.6.1 Détermination du VER de polycristal isotrope en terme de nombre de grains 63
III.6.2 Comportement élastoviscoplastique moyen d'un polycristal à élasticité hétérogène en chargement hydrostatique 65
III.7 Complément de résultats à l'échelle intragranulaire 68
III.7.1 Traversées de microstructure 68
III.7.2 Comportement en fonction de la distance au joint de grain 70
III.8 Résumé des résultats 76

IV Etude en cours, perspectives **77**
IV.1 Evolutions récentes des capacités de résolution numérique 77
IV.2 Etude de l'effet de taille de grain 79
IV.2.1 Relation de Petch, empilement et énergie de faute d'empilement 79
IV.2.2 Alternatives à la proportionnalité en $1/d^{1/2}$ 81
IV.2.3 Récapitulatif de résultats 82

V Conclusion **85**

Liste des figures

II.1 Construction of Voronoï polyhedra on a periodic grid (2D example) 16
II.2 Extension of the model 17
II.3 Two-scale simulations of multiphase polycrystals. Grains are uniformly distributed over three phases, independently on each grain. Cubic domain (250^3 voxels) with periodic boundary conditions. A different grey level is assigned to each phase. 18
II.4 Voronoï polyhedra: display of faces of a cubic domain (250^3 voxels) with periodic boundary conditions. A random grey level is assigned to each grain. 19
II.5 Décomposition d'un cube à $36 \times 36 \times 36$ éléments en 36 sous-domaines 23
II.6 Volume of the grain *vs* distance to the surface of the aggregate 24
II.7 F.E. representations of all the aggregates simulated under isovolumic conditions of load : (a) m1, (b) m3, (c) m4, (d) m5 26
II.8 Comparison of the mean stress–strain response of four aggregates subjected to isovolumic loading conditions : (a) stress in direction x, (b) stress in direction y, (c) axial stress 28
II.9 Effect of the interpolation mode on the mean stress–strain response of the aggregate *m1-238-40* subjected to isovolumic loading conditions 29
II.10 Effect of the interpolation mode on the local slip activity of the *m1-238-40* distribution subjected to isovolumic loading conditions: (left) 5832 quadratic elements, 157464 integration points, (right) 19683 linear elements, 157464 integration points 29
II.11 Effet du choix des éléments sur la contrainte axiale locale d'un biphasé élastique ; le contraste des modules vaut 100, le milieu est constitué de 20 grains sous forme de polyèdres de Voronoï répartis en 2 phases, 70% de dur, 30% de mou ; (a) cubes à 8 nœuds, (b) tétraèdres, (c) microstructure ([Kanit, 2000]) 30
II.12 Evolution de la contrainte axiale (gauche) et latérale (droite) le long des nœuds d'une arête perpendiculaire à l'axe de traction sur les cubes des figures II.11a,b ([Kanit, 2000]) 30
II.13 Effect of the mesh size on the response of the *m4-200-200* microstructure after a 0.2% tension: (a) axial stress *vs* axial strain, (b) min and max local values of the axial stress 31
II.14 Effect of the mesh size on the local behavior of the *m4-200-200* microstructure after 0.2% simple tension: (a) 16^3 quadratic elements, (b) 18^3 quadratic elements, (c) 20^3 quadratic elements, (d) 24^3 quadratic elements 33
II.15 Effect of the mesh size on the local behavior of the *m4-200-200* microstructure after 0.2% simple tension: (a) 16^3 quadratic elements, (b) 18^3 quadratic elements, (c) 20^3 quadratic elements, (d) 24^3 quadratic elements 34
II.16 Réponse effective d'un milieu biphasé élastique à contraste 3 en fonction de la fraction volumique, par EF et par homogénéisation ([Kanit, 2000]) 35

II.17 Effet de la taille du maillage sur la réponse effective d'un milieu biphasé élastique à contraste 100 pour 3 fractions volumiques : 72, 70 et 55% de phase dure ([Kanit, 2000]) 35
II.18 Réponses effectives d'agrégats de zinc en élasticité : (a) modules élastiques pour 200 et 1000 grains, pour un nombre variable d'éléments ; (b) contrainte axiale pour deux réalisations d'agrégats à 447 grains et deux jeux d'orientations aléatoires 36
II.19 La réponse effective de chaque grain de l'agrégat *m4* est calculée avec *(i)* une structure EF de référence ($28 \times 28 \times 28$ éléments), *(ii)* une structure EF plus petite ($12 \times 12 \times 12$ éléments), *(iii)* le modèle d'homogénéisation avec la loi BZ. La réponse du monocristal correspondant à chaque grain est aussi calculée, avec les conditions de chargement de l'agrégat ; chaque réponse est normée avec le résultat de référence (EF 28^3) et présentée en fonction du volume du grain ; (a) déformation axiale (b) contrainte axiale 37
II.20 Comparaison de la distribution de la somme des glissements ($\sum_s |\gamma^s|$) sur une tranche de l'agrégat *m4* décrit avec (a) $18 \times 18 \times 18$ éléments, (b) $28 \times 28 \times 28$ éléments, (c) $32 \times 32 \times 32$ éléments, (d) Carte des grains sur la structure à $18 \times 18 \times 18$ éléments 39
II.21 Stress-strain curves for each basic orientation of the standard triangle for the *m1-238-40* microstructure tensile strained at 1.5% with isovolumic conditions 41

III.1 Simulations of tensile tests to 1.5% axial strain, from BZ-homogenisation and F.E., with different loading conditions: (a) axial stress *vs* axial strain, (b) lateral strains *vs* axial strain 47
III.2 Illustration of inter- and intra-granular heterogenity from the mean response of each of the 200 grains of the polycrystal: (a,b) BZ-homogenisation; (c,d) F.E. HSB; (e,f) F.E. 4FF; (left) σ_{zz} *vs* ε_{zz}, (right) σ_{xx} *vs* σ_{zz} 49
III.3 Mean stress paths in each of the 200 phases of the polycrystal tensile strained at 1.5% with isovolumic conditions 50
III.4 (left) final state in the stress-strain plane for all the grains according to their volume, (right) volume of the grain *vs* distance to the surface of the aggregate 50
III.5 Stress heterogenity between the grains according to (left) their volume, (right) their distance to the surface 50
III.6 (left) Grain map, (right) contour of the norm of the lattice rotation vector at the onset of plastic deformation 51
III.7 Contour of the equivalent cumulated plastic strain on two slices of the interior bulk: (left) slice perpendicular to the *x* axis, (right) slice perpendicular to the *y* axis 52
III.8 Contour of the amount of plastic slip on a lateral face of the polycrystal subjected to the conditions (a) 4FF, (b) MB, (c) HSB; (d) associated grain map 53
III.9 Intragranular heterogenity and effect of the free surface: responses at three strains ($E = 0.5\%$, 1.0%, 1.5%) of all the points within *grain58* (2265 points); (a, b) σ_{zz} *vs* ε_{zz}; (c, d) σ_{xx} *vs* σ_{zz}; (e, f) σ_{yy} *vs* σ_{zz}; (left) case F.E. HSB, (right) case F.E. 4FF 54
III.10 Intragranular heterogenity and effect of the free surface: responses at three strains ($E = 0.5\%$, 1.0%, 1.5%) of all the points within *grain132* (545 points); (a, b) σ_{zz} *vs* ε_{zz}, (c, d) σ_{xx} *vs* σ_{zz}, (e, f) σ_{yy} *vs* σ_{zz}; (left) case F.E. HSB, (right) case F.E. 4FF 55
III.11 Variables averaged in planes parallel to a lateral face of the polycrystal in the four cases of load: (a) equivalent stress, (b) equivalent strain (c) amount of plastic slip, (d) equivalent cumulated plastic strain, (e) maximum plastic slip over the twelve systems, (f) number of slip systems whose plastic slip exceed 0.001 58

III.12 Evolution of the amount of plastic slip on a line perpendicular to the free surface of the polycrystal in the four cases of load; the line is located in the core and goes from side to side 60
III.13 Contour of the von Mises stress on a lateral face of the polycrystal subjected to the conditions (a) 4FF, (b) MB, (c) HSB. Fig. III.8d shows the corresponding grain map 61
III.14 Courbes de traction effectives de multicristaux de cuivre élastoviscoplastique avec un nombre variable de grains (de 10 à 1000) 64
III.15 (droite) Distribution de la contrainte équivalente de von Mises sur la surface d'un agrégat de zinc élastique (gauche) soumis à un chargement mixte en traction isovolumique 65
III.16 Courbes effectives d'un polycristal de zinc élastoplastique en chargement hydrostatique alterné (charge, décharge) : (gauche) contraintes, (droite) somme sur les systèmes des glissements cumulés, pour les trois familles 67
III.17 Evolution de la déformation (haut) et de la contrainte axiale (bas) le long d'une ligne traversant l'agrégat m4 (200 grains), par EF (28^3 éléments) et par homogénéisation 69
III.18 Réponse locale en chacun des points de *grain58* (le plus gros de la microstructure à 200 grains *m4*) en fonction de la distance au joint de grain ; (gauche) déformation axiale, (droite) contrainte axiale 71
III.19 Variables moyennées dans des intervalles de distances au joint de grain (de taille 0.01, 0.06, 0.1, 0.3) en fonction de la distance au joint de grain ; ces variables sont en outre moyennées sur l'ensemble des grains ; (a) contrainte équivalente de von Mises, (b) déformation plastique équivalente cumulée, (c) somme des glissements cumulés, (d) somme des cissions résolues, (e) nombre de systèmes dont le glissement excède 0.1% du glissement maximum, (f) nombre de systèmes dont la cission résolue excède 92% de la cission résolue maximum 72
III.20 Distribution du nombre de systèmes dont le glissement a dépassé 10% du glissement maximum sur des tranches d'éléments *à l'intérieur* du polycristal *m4* à 200 grains 74
III.21 Ecart Moyen Relatif en moyenne dans des intervalles de distances au joint de grain (de taille 0.01, 0.06, 0.1, 0.3) en fonction de la distance au joint de grain ; ces variables sont aussi moyennées sur l'ensemble des grains ; (gauche) écart moyen pour la somme des glissements, (droite) écart moyen pour la somme des cissions résolues 75
III.22 Nombre *moyen* de points dans chaque intervalle de distance au joint de grain, pour des intervalles de taille 0.01, 0.06, 0.1, 0.3, en fonction de la distance au joint de grain 76

Liste des tableaux

III.1 Effect of the free surface on the mean behavior in particular grains: number of active slip systems together with the maximum cumulated slip 59
III.2 Contraintes axiales normées de polycristaux de cuivre élastoplastiques pour une déformation axiale $\varepsilon = 0.002$ (la figure III.14 présente les courbes de traction correspondant à cette mesure). Les contraintes sont normées par rapport à la contrainte axiale obtenue avec le polycristal à 1000 grains 63

IV.1 Travaux et résultats sur l'effet de taille de grain 84

Introduction

La mécanique des matériaux a fait l'objet d'études systématiques et approfondies depuis le développement de l'industrie. L'objectif poursuivi n'est pas seulement de développer de nouveaux produits et d'améliorer les performances des produits existants mais aussi de réduire les coûts engendrés par la conception, la fabrication et l'utilisation des produits. Dans ce cadre de progrès, l'expérience ne peut pas nous apporter toutes les solutions vu qu'elle ne concerne que des produits existant déjà. A une étape ou à une autre du développement, de la transformation d'un objet, il faut appréhender au mieux les problèmes avant le passage à l'étape suivante, dans un souci d'efficacité. Pour ce faire, on caractérise le comportement physique de l'objet à partir d'abaques ou de lois mathématiques : on cherche à reproduire analytiquement ou par simulation numérique les mesures expérimentales du comportement du matériau constitutif de l'objet. Une fois le modèle de comportement du matériau établi par rapport aux conditions expérimentales, on peut étendre le champs d'étude à des cas de sollicitations non explorés expérimentalement en modifiant les données de la modélisation : on peut agir sur les conditions de sollicitation, sur la géométrie de l'objet, ou adapter la modélisation à un autre matériau aux propriétés voisines, en adoptant d'autres paramètres pour les lois de comportement. Pour déterminer ces paramètres, il faut disposer de mesures expérimentales auxquelles peuvent être confrontées les simulations avec les lois de comportement pressenties et faire varier les paramètres -optimiser- jusqu'à pouvoir identifier la modélisation à l'expérimentation.

Les modèles ainsi élaborés fournissent donc des éléments d'information pour la prédiction du comportement d'objets dans des configurations données. Du fait de ce caractère prédictif, ils constituent des outils de développement à moindre coût qui ont suscité beaucoup d'intérêts auprès des scientifiques et des industriels. Il en résulte une littérature très vaste sur l'étude expérimentale du comportement mécanique des métaux, le développement de modèles et de méthodes numériques pour traiter les problèmes modélisés. La diversité des modèles actuellement disponibles à l'état de code numérique permet de situer l'échelle de validité d'un modèle. Ainsi pour décrire le comportement mécanique a-t-on successivement utilisé des modéles phénoménologiques basés sur une représentation à l'échelle macroscopique, des modèles d'homogénéisation basés sur une représentation des hétérogénéités à l'échelle immédiatement inférieure au macroscopique et des modèles d'éléments finis décrivant le comportement à des échelles plus fines de microstrutures. L'augmentation des capacités de résolution numérique a permis de tenir compte, dans les simulations, de mécanismes physiques de plus en plus fidèles à la réalité et d'augmenter conjointement la taille physique des problèmes traités. Aujourd'hui la méthode de modélisation par éléments finis est avérée valable pour des configurations et des échelles très largement explorées expérimentalement.

Mais l'application d'une telle méthode ne se limite pas simplement à la prédiction de comportements réels, elle permet aussi d'accéder à des informations que l'on ne peut pas obtenir expérimentalement. La modélisation fixe toutes les données entrantes d'un problème, elle offre toutes les données résultantes et elle permet d'analyser rétrospectivement les processus qui ont conduit au résultat, sans affecter le résultat. L'expérimentation prend en compte des phénomènes physiques dont certains échappent à notre contrôle et elle peut nécessiter de tranformer le milieu d'étude sans que soient connus/réversibles/reproductibles les mécanismes qui ont conduit au résultat : quand il est question de prendre des mesures de morphologie et de champs de déformations au cœur d'une microstructure métallique, il faut d'abord enlever des couches externes de matière ; l'expérience ne peut alors plus être poursuivie avec le milieu expérimental initial ; l'enlèvement de matière peut aussi introduire des défauts, des modifications de l'état microstructural au voisinage de la zone traitée. Dans une telle configuration, pour autant que l'échelle à laquelle des mesures sont requises soit accessible, la mise en place de l'étude peut être très coûteuse car très longue et très précautionneuse, voire impossible car la prise de mesures affecterait irréversiblement l'état du matériau. Le traitement numérique peut alors apporter des informations singulières (pour le moins des champs de contrainte) qui alimentent d'une part la connaissance des modèles de comportement -leur degré de validité, leur sensibilité aux données . . . - mais aussi celle du monde physique, avec un degré de validité connu.

Cette démarche d'étude sur la base d'une modélisation est adoptée dans ce travail de thèse. Nous utilisons la méthode des éléments finis (EF) pour décrire les champs de contraintes et de déformations issus de glissements cristallographiques à l'intérieur des grains d'un agrégat polycristallin de matériau métallique. A partir de cette description, nous effectuons une analyse à toutes les échelles de la modélisation pour caractériser le comportement élastoviscoplastique en petites déformations d'un polycristal 3D et déduire des informations propres à l'amélioration de modèles alternatifs -l'homogénéisation par exemple. Cette approche pour l'étude de la plasticité cristalline se justifie dans le sens où elle a été éprouvée à plusieurs reprises et validée par confrontation avec des études expérimentales. Prenons en pour exemple les travaux de thèse de Laurent Méric et de Frank Eberl portant sur des mono-, bi- et multi-cristaux : ils ont montré que les calculs EF en élastovicoplasticité avec le code ZéBuLoN, que nous utilisons ici, fournissaient des résultats très corrects par rapport à des expérimentations, pas seulement à l'échelle macroscopique mais surtout à l'échelle intragranulaire [Méric, 1991, Eberl, 1999].

Leur cadre d'étude est ici étendu, grâce à l'augmentation des ressources numériques et à la parallélisation des calculs, au *Volume Elémentaire Représentatif* d'un milieu polycristallin 3D. C'est un volume suffisamment grand par rapport à la taille des hétérogénéités qu'il contient pour que la distribution, particulière à une réalisation, des propriétés des hétérogénéités du milieu n'affecte pas le comportement *global* du VER. Nous donnons ci-après une description précise de ce VER pour le milieu qui nous concerne.

Dans un métal solide on peut raisonnablement considérer l'atome -occupant un espace de l'ordre de $1nm^3$- comme hétérogénéité élémentaire dans un volume de l'ordre de $1\mu m^3$, ce qui est largement en deça de l'échelle d'étude macroscopique d'un milieu polycristallin (de l'ordre du mm). Ce milieu solide est obtenu après refroidissement d'une solution liquide de métal pur ou d'alliage. Au cours de ce refroidissement, les atomes perdent peu à peu leur énergie de vibration liée à l'échauffement thermique initial, les forces d'attraction métalliques permettent alors aux atomes de s'arranger en une structure présentant des symétries associées à l'équilibre des forces. Le point où s'initie l'assemblage des atomes en une structure s'appelle le germe et la structure élémentaire

reproduite périodiquement dans l'espace s'appelle la maille élémentaire cristalline. Pendant le refroidissement plusieurs germes se forment en divers points de la solution. En chacun de ces germes viennent s'accrocher des atomes qui, afin de respecter l'équilibre des forces, reproduisent les symétries et la périodicité de la maille cristalline. Le volume formé par un empilement périodique de mailles cristallines dans les trois directions de l'espace constitue un cristal.

En fin de refroidissement, le volume de solution s'est entièrement solidifié, chaque cristal a grossi jusqu'à rentrer en interaction avec un autre cristal et former une jonction constituée d'un amas d'atomes d'une épaisseur de quelques atomes appelé joint de grain. Chaque cristal se distingue d'un autre par l'orientation de sa maille cristalline, sa forme et sa taille. Cette taille est contrôlable par la durée du refroidissement de la solution ou par une restauration des contraintes internes associée à une recristallisation au cours d'un recuit. Cette taille est, pour la plupart des applications courantes à base de métaux et d'alliages, supérieure à 1000 distances interatomiques (de l'ordre du μm). Une maille cristalline étant constituée généralement de quelques distances interatomiques, l'hétérogénéité formée par la maille cristalline n'est pas significative des caractéristiques effectives du cristal. On peut donc considérer un cristal comme un milieu homogène caractérisé par son orientation cristallographique, sa taille et sa forme géométrique.

Dans un VER de milieu polycristallin, les hétérogénéités élémentaires sont les cristaux (grains). Dans le cas d'un milieu aléatoire, sans corrélation entre les orientations des grains et sans autre règle concernant la forme des grains que celle d'occuper l'espace sans laisser de vide, les propriétés sont globalement isotropes. La réponse globale du VER doit rester la même quelle que soit sa position dans ce milieu. Autrement dit, la donnée de la microstructure -position des germes et orientations-, pourvu qu'elle soit aléatoire, ne doit pas affecter les caractéristiques globales du VER.

Dans ce cadre d'étude du VER de polycristal isotrope, il ne s'agit pas pour nous de reproduire des observations de la physique des matériaux métalliques car ces observations se situent à une échelle bien plus fine (l'atome, la dislocation ou les densités de dislocations), nous nous limitons à poursuivre le travail du mécanicien à l'échelle homogène intragranulaire : nous simulons le comportement élastoplastique de polycristaux à partir d'une description d'un VER par des éléments finis. Le milieu polycristallin 3D que nous représentons est constitué de polyèdres de Voronoï et il est donné sous la forme d'un fichier de voxels (pixels 3D). La structure EF calculée est une discrétisation de ce milieu : à chaque point d'intégration de la structure on attribue la couleur du voxel occupant la même position de l'espace ; ainsi les grains sont définis par un ensemble de points d'intégration et leur frontière traverse les éléments, ce qui permet d'affiner considérablement la forme des grains avec des éléments à 27 points d'intégration. Grâce au calcul parallèle nous pouvons raisonnablement, à l'heure actuelle, faire figurer 6000 points d'intégration par grain d'un polycristal à 200 grains, ce qui offre la possibilité de procéder à une véritable analyse du comportement intragranulaire. Nous décrivons des variations de comportement à l'intérieur des grains mais ces variations ne sont pas dues à des hétérogénéités structurelles intragranulaires (murs denses de dislocations, frontières géométriquement nécessaires, forêts de dislocations ...) mais aux interactions entre les grains et à la forme géométrique particulière à chaque grain.

Ce document est partagé en 4 chapitres. Le premier propose une revue bibliographique consacrée aux modèles de comportement de polycristaux et aux aspects expérimentaux de la plasticité intracristalline. Ainsi pouvons-nous situer cette étude par rapport à une gamme très étendue de travaux de caractérisation physique et de modélisation à différentes échelles et en déduire ses spécificités.

Dans le second nous présentons les modèles de comportement et les outils numériques : les lois

de comportement de monocristaux, les lois de transition d'échelle du monocristal au polycristal pour le schéma auto-cohérent, le modèle de génération de microstructures hétérogènes appliqué aux milieux polycristallins, la description d'un VER et de sa microstructure par des éléments finis, l'étude de validité de nos outils numériques.
Le chapitre III porte sur les résultats obtenus aux différentes échelles de la modélisation (macroscopique, échelle moyenne des grains, intragranulaire). Une attention particulière est portée sur l'effet des conditions aux limites (effet de surface libre) et sur l'effet des joints de grain, que nous caractérisons non seulement à l'échelle locale mais aussi en moyenne pour tous les grains d'un polycristal. Les chapitres II et III sont formés en partie d'articles publiés dans *Int J Plasticity* en 2001 [Barbe et al., 2001a, Barbe et al., 2001b]. Nous y avons associé des compléments de caractérisation des hétérogénéités dans un polycristal et une analyse de l'effet local *et* moyen des joints de grain dans un polycristal.
Nous présentons dans le chapitre IV les derniers avancements en matière d'implémentation de méthodes numériques moins coûteuses en mémoire, qui permettront d'aborder la simulation de structures plus raffinées, ainsi qu'une étude bibliographique de l'effet de taille de grains. Cette revue a été préparée pour confronter nos résultats de l'étude de l'effet de taille de grain par la modélisation à des résultats expérimentaux. Une première étude a effectivement été menée, qui a fait l'objet de l'article [Forest et al., 2000] reproduit en annexe, pour mesurer cet effet à partir d'une modélisation non locale de type Cosserat développée par Forest. Même si notre caractérisation s'avère cohérente avec certaines mesures expérimentales, elle doit être approfondie ou modifiée pour permettre de décrire la multiplicité des effets de taille de grains relevés dans la littérature.

Chapitre -I-

Revue bibliographique

Sommaire

I.1 Modèles phénoménologiques et modèles à champs moyens 1

I.2 Modèles Eléments Finis 6

I.2.1 Description régulière des grains 6

I.2.2 Description détaillée de chaque grain 7

I.3 Aspects expérimentaux, structures de dislocations, effets d'échelle 8

Ce chapitre établie tout d'abord une revue de travaux de modélisation du comportement des matériaux métalliques, depuis les modèles les plus simples considérant le milieu d'étude polycristallin comme homogène jusqu'aux modèles prenant en compte les hétérogénéités de comportement intracristallines, à savoir les interactions entre dislocations. Ceci nous avise de la compléxité des mécanismes introduits dans les modélisations et de la multiplicité des approches. Ensuite nous réduisons le champs d'investigation aux travaux qui, comme le nôtre, font appel appel à la méthode EF. Nous nous assurons ainsi des la spécificité du cadre et des objectifs de notre étude. Pour finir, nous rappelons certains aspects expérimentaux du comportement des matériaux métalliques et les dispositions qui ont été prises en conséquence dans des modélisations récentes. Nous définissons ainsi clairement le cadre de notre modélisation, ce qu'elle ne prend pas en compte et qui pourrait l'être dans un futur proche.

I.1 Modèles phénoménologiques et modèles à champs moyens

L'étude du comportement d'un polycristal repose sur le comportement de chacun des monocristaux du milieu et sur l'accommodation des déformations et contraintes entre ces grains. La transition d'échelle entre les champs microscopiques et le champ mécanique macroscopique imposé constitue donc une étape essentielle dans la prédiction du comportement global. Il s'agit en général d'une opération de moyenne, ou homogénéisation du comportement du polycristal. De la même manière le comportement de chaque grain est déterminé à partir des glissements sur chacun des systèmes de glissement et ces glissements résultent de mouvements de dislocations

fortement hétérogènes dont l'activité dépend des contraintes locales et des structures de dislocations présentes. L'échelle la plus petite prise en compte dans les lois de comportement que nous utilisons est celle des systèmes de glissement. Les variables qui y sont décrites (glissement, cission) sont elle-mêmes des moyennes représentatives du comportement moyen à l'échelle des dislocations. Cette échelle de description du comportement est accessible en chaque point de la représentation de la microstructure, à savoir, suivant la précision de représentation, *(i)* en moyenne macroscopique, *(ii)* en moyenne par phase (une phase regroupe plusieurs grains d'orientations voisines), *(iii)* en moyenne par grain, *(iv)* en chaque point à l'intérieur d'un grain. Notre échelle de représentation nous permet de décrire un comportement intragranulaire hétérogène.

Une première approximation est obtenue avec le modèle de Taylor [Taylor, 1938] supposant que la déformation plastique est la même dans tous les grains. La compatibilité des déformations est alors assurée entre les grains mais l'équilibre des contraintes n'est pas respecté. La réponse d'un tel modèle fournit une borne supérieure du comportement réel. Pour les métaux cubiques à faces centrées (cfc), cette approximation est intéressante en grandes déformations car alors il est plus important de satisfaire la compatibilité des déformations que l'équilibre des contraintes [Kocks, 1970]. Une estimation de la borne inférieure du comportement est obtenue avec l'hypothèse de Sachs selon laquelle les contraintes sont uniformes dans le polycristal (l'équilibre des contraintes est donc respecté, à défaut de la compatibilité des déformations entre grains). Cette configuration de comportement serait obtenue si un seul système de glissement était actif par grain. La configuration de déformation uniforme adoptée par Taylor correspond, dans l'extension opérée par Bishop et Hill, [Bishop et Hill, 1951], à un glissement multiple sur cinq systèmes indépendants. Puisque cette configuration fournit une réponse majorée, certains auteurs ont repris l'hypothèse de base d'uniformité des déformations et y ont associé une loi de relaxation des contraintes intergranulaires. Citons par exemple Kocks et Canova qui, dans leur modification du modèle de Taylor, permettent l'activation de moins de cinq systèmes de glissement [Kocks et Canova, 1981]. Or pour obtenir une déformation plastique donnée, la contrainte nécessaire diminue si le nombre de systèmes de glissement requis diminue. Ainsi observent-ils un léger adoucissement de la réponse de Taylor. Cet adoucissement reste modéré car il ne concerne qu'une petite partie du volume polycristallin et il en résulte une hétérogénéité du nombre de systèmes actifs qui nécessite d'être ajustée localement par une augmentation de la contrainte. Dans les modèles basés sur l'hypothèse d'activation initiale d'un seul système par grain -*le système primaire*- [Ashby, 1970, Thompson, 1974, Thompson, 1975, Leffers, 1981], l'amélioration de la modélisation a consisté à distinguer les dislocations *statistiquement stockées*, associées à une déformation homogène (la distribution de ces dislocations est aléatoire), des dislocations dites *géométriquement nécessaires* [Cottrell, 1964]. D'après Cottrell, au cours de la déformation à froid d'un polycristal, des contraintes apparaissent à l'interface entre les grains pour assurer la compatibilité des déformations. Ces contraintes sont relaxées par la génération de ces dislocations géométriquement nécessaires. L'accommodation des déformations proposée par Thompson et Leffers résulte de l'activation, par les dislocations géométriquement nécessaires, d'autres systèmes que le système primaire. Elle provoque une augmentation des contraintes intergranulaires ce qui renforce la réponse du modèle initial de Sachs.

De ces présentations des modèles fondamentaux de déformation des polycristaux retenons deux constatations : on ne peut pas considérer que la déformation [resp. la contrainte] soit homogène dans tout le volume polycristallin, sinon on obtient une réponse trop rigide [resp. trop souple] ; de même, on ne peut pas considérer que la déformation [resp. la contrainte] soit homogène à l'intérieur de chaque grain, sinon l'équilibre des contraintes [resp. l'accommodation des déformations] n'est pas respecté entre les grains.

Pourtant, dans un cadre de prédiction des propriétés effectives d'un polycristal, il est tentant de garder une hypothèse simplificatrice : considérons que le grain constitue une hétérogénéité élémentaire dans laquelle les champs mécaniques sont homogènes. Si le nombre de grains est suffisant, l'accommodation des déformations et l'ajustement des contraintes entre les grains peut se décrire par une moyenne. Dans l'approche auto-cohérente, l'interaction intergranulaire moyenne est déterminée par la moyenne des interactions de chaque grain avec un Milieu Homogène Equivalent (MHE). Parmi tous les exemples de la littérature concernant le calcul de polycristal par un processus de moyennation nous pouvons citer : [Lin, 1957, Kröner, 1961, Budianski et Wu, 1962, Hill, 1965, Berveiller et Zaoui, 1979, Tokuda et al., 1985, Beradai et al., 1987, Weng, 1987, Cailletaud, 1992, Weng, 1993, Cailletaud et Pilvin, 1994, Pilvin, 1996, Cuitiño, 1997]

Dans tous ces travaux, la relation générale entre les mécanismes locaux de déformation ε à l'échelle du grain et le comportement global macroscopique peut se résumer ainsi :
$\sigma_{ij} =< \sigma_{ij} > +A\mu(< \varepsilon^p_{ij} > -\varepsilon^p_{ij})$ (μ : module élastique de cisaillement)
- modèle de Taylor : déformation plastique uniforme –> $A = infini$
- modèle de Lin : déformation totale uniforme –> $A = 2$
- modèle auto-cohérent de Kröner (Budiansky-Wu) –> $A = 2(1-\beta)$
- modification de Berveiller-Zaoui –> $A = 2a(1-\beta)$
- modèle de Sachs : contrainte uniforme –> $A = 0$
($\beta = 2(4-\nu)/15(1-\nu)$; $a = 1/(1+3\mu\varepsilon^p_{ef}/2\sigma_{ef})$)

Concernant ces modèles, tant basés sur une hypothèse de type Taylor ou Lin que auto-cohérents, la principale simplification consiste à ne pas prendre en compte les interactions directes entre grains voisins : ils utilisent des *phases*, caractérisées par leur orientation cristalline et leur fraction volumique, qui interagissent avec un milieu homogénéisé, sans considération de voisinage local. Ces phases représentent le comportement moyen de tous les grains d'orientations cristallographiques voisines. Cette simplification pose pour le moins deux problèmes :
(i) les mécanismes d'écrouissage sont liés aux mouvements de dislocations sur les systèmes de glissement et ces mouvements sont limités par les joints de grain (dans les cas d'un comportement à basse température, sans recristallisation, les dislocations franchissent rarement le joint, elles s'y accumulent ou s'y annihilent). Ainsi les propriétés effectives d'un polycristal dépendent-elles de la taille moyenne des grains, ce qui n'est pas retenu dans les modèles présentés ci-dessus.
(ii) les contraintes internes dans un grain sont dépendantes de son orientation cristallographique mais aussi de celle des grains voisins, comme l'a expliqué Leffers [Leffers, 1981] : alors que les dislocations des systèmes de glissement sont stoppées à l'approche des joints de grain, elles produisent une relaxation de contrainte (back stress) ainsi qu'une contrainte 'externe' (forward stress) dans les grains voisins. Les glissements dans un grain sont donc liés aux glissements des grains voisins et par suite aux désorientations relatives.

Par ailleurs, il a été montré au travers des simulations EF en grandes déformations que ces interactions de voisinage constituent un facteur essentiel pour la détermination de la propagation de la déformation imposée au travers des cristaux d'un agrégat [Becker, 1991, Becker et Panchanadeeswaran, 1995, Sarma et Dawson, 1996a, Mika et Dawson, 1998, Zisman et Rybin, 1998]. C'est pourquoi il paraît essentiel de tenir compte du voisinage réel de chaque grain d'un polycristal pour en déterminer les propriétés effectives. Les solutions exposées dans la littérature sont multiples. En voici dans la suite quelques exemples.

a - Solutions pour une modélisation prenant en compte le voisinage dans des modèles à champs moyens

L'effet d'interaction entre les grains peut être incorporé dans le calcul de chaque cristal considéré individuellement [Sarma et Dawson, 1996b] : à chaque cristal de l'agrégat modélisé est associé une information topologique relative au voisinage local, *i.e.* à l'orientation cristallographique des grains voisins ; l'interaction qui en résulte est déterminée, a priori, par approximation de la réponse du cristal d'après un modèle de Taylor :
(1) la complaisance S_c de chaque grain est calculée avec le modèle de Taylor,
(2) la complaisance moyenne due au voisinage est donc $< S_c >_n = 1/n \sum_{g=1}^{n} S_g$ où n est le nombre de grains voisins,
(3) la complaisance relative Q_c est déduite par projection : $Q_c = S_c < S_c >_n^{-1}$,
(4) enfin cette complaisance relative est renormée afin de satisfaire l'égalité de la moyenne des taux de déformation avec le taux effectif ; on obtient l'opérateur normé de projection P_c pour chaque cristal ; $P_c = Q_c < Q >_N^{-1}$ où $< Q >_N = 1/N \sum_{c=1}^{N} Q_c$ est la moyenne des complaisances relatives sur l'ensemble des grains,
(5) finalement le taux de déformation de chaque cristal est donné par $D_c = P_c D$ où D est le taux de déformation macroscopique imposé.

Pour palier le défaut de non prise en compte du voisinage tout en gardant l'approximation du schéma auto-cohérent, il est possible d'utiliser un modèle d'homogénéisation à N sites [Molinari et al., 1987, Canova et al., 1992] mais la complexité de la procédure itérative de résolution limite le champ d'application de cette approche.
Une autre méthode pour décrire le comportement d'un polycristal à partir de la description du comportement d'un monocristal a été proposée par Khan et Cheng [Khan et Cheng, 1996] : l'interaction entre grains n'est pas décrite par une loi de transition d'échelle reliant les contraintes par grain à la contrainte macroscopique mais est supposée équivalente à une interaction entre systèmes de glissement ; le passage du monocristal au polycristal revient donc à une augmentation du nombre de systèmes de glissement qui apporte une contribution additive à l'écrouissage cinématique, sans affecter l'écrouissage isotrope.
Pour la modélisation de l'écrouissage des alliages cfc à faible énergie d'empilement, Kalidindi [Kalidindi, 1998] a utilisé un modèle mathématique simple à une variable d'état interne (s homogène à une contrainte) prenant en compte les mécanismes de déformation par maclage. La loi d'évolution est $\dot{s} = h(s)|\dot{\varepsilon}_{eq}^{p}|$ où $h(.)$ représente le taux de déformation plastique et $\dot{\varepsilon}_{eq}^{p}$ est la déformation plastique équivalente. Ce modèle permet de prévoir le comportement de tels alliages pour des tailles de grains différentes, à condition d'avoir procédé au préalable à l'identification de paramêtres d'écrouissage propres à l'alliage étudié.

b - Prise en compte du comportement hétérogène intragranulaire pour la modélisation de l'effet de voisinage

Nous venons de présenter certaines approches phénoménologiques ou à champs moyens pour lesquelles les champs mécaniques sont considérés uniformes par grain. Or la prédiction de la relation contrainte-déformation ou de l'évolution de texture avec ces modèles est parfois mise en défaut par des observations expérimentales : outre les interactions intergranulaires, il faut tenir compte des mécanismes de déformation à l'intérieur des grains, des processus de subdivision des grains, autrement dit de l'accommodation des efforts intergranulaires par la formation de sous-structures intragranulaires (voir section I.3 pour une description de ces sous-structures). C'est tout du moins la constatation qu'ont fait Mika et Dawson pour la prédiction d'évolution de texture

par éléments finis [Mika et Dawson, 1999]. Un exemple simple de processus de subdivision de grain introduit dans un modèle de comportement de polycristal est celui de Ashby [Ashby, 1970] : il suppose que chaque grain se déforme en glissement simple et que cela conduit au stockage de dislocations du même type unique, aux vecteurs de Burgers opposés sur les parties opposées du joint de grain ; les grains sont donc subdivisés en deux régions, l'une à faible densité de dislocations où la déformation est homogène (dislocations statistiquement stockées), l'autre à plus forte densité de dislocations où s'opère l'accommodation des déformations entre les grains (dislocations géométriquement nécessaires). Dans le modèle 2D de Ashby, cette zone où sont générées les dislocations géométriquement nécessaires n'est ni plus ni moins qu'une bande collée au joint de grain.

Afin d'expliquer le rôle des dislocations du modèle de Ashby dans l'accommodation des déformations, Mecking [Mecking, 1981] propose de classer ces dislocations en deux groupes : les unes à vecteur de Burgers parallèle au joint de grain, les autres au vecteur de Burgers perpendiculaire au joint de grain. Les dislocations à vecteur de Burgers parallèle au joint contribuent aux déformations normales au joint de grain et la contrainte qu'elles supportent peut être compensée par des dislocations de directions opposées dans les grains adjacents. Celles à vecteur de Burgers perpendiculaire au joint supportent les contraintes élastiques d'accommodation à longue portée et ces contraintes peuvent être tant diminuées qu'augmentées par les dislocations des grains voisins -cela dépend de la désorientation entre les grains donc de la géométrie-. Mecking déduit de son analyse que la situation de déformation en glissement simple n'est valable que pour le début de l'écrouissage (déformation de l'ordre de 10^{-3}), jusqu'à ce que les contraintes à longue portée des dislocations géométriquement nécessaires deviennent trop fortes par rapport à la contrainte d'écoulement d'un cristal en glissement simple. L'accommodation se fait alors par glissement multiple, dans une bande parallèle au joint de grain. En supposant que l'épaisseur de cette bande varie linéairement avec la déformation, Mecking montre que la contrainte d'écoulement peut être fonction linéaire de $1/d$ ou de $1/d^{1/2}$, en fonction de la règle de superposition des efforts utilisée (distribution simple de la contrainte dans les deux phases ou détermination de la contrainte dans la bande à partir de la théorie d'empilement des dislocations).

Le modèle d'Estrin et ses coauteurs [Estrin et al., 1998] propose lui aussi une décomposition des grains en des régions à faible densité de dislocations (l'intérieur des cellules de dislocations) et des régions à forte densité de dislocations (les murs de dislocations). La particularité de leur modèle est qu'il permet de décrire tous les états de l'écrouissage car il prend en compte la densité de dislocations à l'intérieur des cellules (toute négligeable paraisse-t-elle par rapport à celle des murs) et la variation de la fraction volumique de murs de dislocations au cours de la déformation (observation expérimentale de ce rétrécissement des murs par [Zehetbauer et al., 1999]). Parmi les modèles basés sur la formation de sous-structures de grain, les plus simples introduisent simplement la contribution des dislocations géométriquement nécessaires dans l'évolution de la contrainte d'écrouissage par une surface de charge dont le rayon varie avec la direction de chargement. L'écrouisage supplémentaire provoqué par la formation de nouveaux blocs cellulaires est lui aussi pris en compte. Ces modèles permettent de décrire particulièrement bien des comportements effectifs en grandes déformations sous chargements complexes [Hess, 1993, Ning et Aifantis, 1996, Butler et McDowell, 1998, McGinty et McDowell, 1999].

Pour la prédiction du comportement de métaux cfc dans une gamme très étendue de températures, de taux de déformation et de déformation, il n'est pas obligatoire de faire paraître l'interaction directe entre grains car pour de très grandes déformations, le comportement est susceptible de devenir plus sensible aux caractéristiques microstructurales (distance entre deux barrières de dis-

locations par exemple) qu'aux caractéristiques du niveau d'hétérogénéité supérieur, les grains. Effectivement, plus la déformation est élevée, plus il y a de structures de dislocations (à part les joints de grain, il n'y en a pas à déformation nulle). L'utilisation d'un modèle basé sur la densité et la vélocité des dislocations mobiles prend alors tout son sens comme l'ont montré Nemat-Nasser et Li [Nemat-Nasser et Li, 1998].

c - Prise en compte des interactions entre dislocations pour la modélisation du comportement hétérogène dans un monocristal

A une échelle physique plus fine que la sous-structure de grain (*frontières géométriquement nécessaires, murs denses de dislocations, frontières de dislocations intracellulaires (incidentes)* ...) se trouvent les dislocations sous forme de *forêts* de dislocations formant des obstacles au mouvement des dislocations individuelles (l'échelle physique juste en dessous). Des modélisations phénoménologiques introduisant des amas de dislocations existent à cette échelle mais elles n'ont été appliquées qu'à la modélisation de monocristaux [Cuitiño et Ortiz, 1991, Tabourot et al., 1997, Cuitiño, 1997, Fivel et al., 1998]. Les modélisations actuelles basées sur les mouvements de dislocations individuelles portent sur des éléments de volume mésoscopiques, *i.e.* sur un volume de milieu monocristallin pas suffisamment grand pour être représentatif du comportement effectif. Zbib et ses co-auteurs présentent par exemple un modèle mésoscopique tridimensionnel permettant la description d'interactions à longue distance et des structures cellulaires de dislocations qui en résultent, avec l'utilisation de superdislocations 3D [Zbib et al., 1998]. Enfin, pour alimenter notre culture sur les théories de plasticité cristalline basées sur les dislocations, il semble utile de consulter le récent article de Doris Kuhlmann-Wilsdorf, qui nous propose une revue de la théorie basée sur des structures de dislocations à basse énergie ("low energy dislocation structure"), en comparaison avec la théorie la plus répandue, la théorie d'auto-organisation des dislocations que nous associons -à tort nous est-il dit- à Orowan [Kuhlmann-Wilsdorf, 1999].

I.2 Modèles Eléments Finis

I.2.1 Description régulière des grains

De nombreux auteurs ont choisi d'adopter une description EF simplifiée de la microstructure d'un polycristal. Chaque élément du maillage, de forme carrée, cubique ou hexagonale correspond alors à une ou plusieurs orientations cristallographiques différentes. [Takahashi, 1988, Becker, 1991, Kalidindi et al., 1992, Havlicek et al., 1992, Beaudoin et al., 1993, Takahashi et al., 1994, Beaudoin et al., 1995, Sarma et Dawson, 1996a, Dawson et Marin, 1998, Takahashi et al., 1998, Bachu et Kalidindi, 1998]. Une telle méthode ne permet pas d'obtenir d'information sur le comportement local et la morphologie de la microstructure réelle n'est pas prise en compte. Mais ces travaux sont bien adaptés à la prédiction de la réponse globale de l'agrégat et notamment à la prédiction d'évolution de texture, incluant une description des grandes déformations avec rotation du réseau cristallin. Ainsi par exemple Bachu et Kalidindi constatent que leur modélisation EF 3D fournit de bien meilleurs résultats que le modèle de Taylor pour la prédiction d'évolution de texture et que les résultats sont peu sensibles à la distribution des orientations dans la structure d'étude. Cette relative insensibilité du modèle est prévisible dans la mesure où on n'offre pas aux grains la possibilité de se déformer en fonction de conditions de sollicitations étendues : les déplacements/efforts sont toujours imposés aux huit coins d'un cube, dans des directions variant peu d'un grain à l'autre (plus les déformations sont grandes, plus les déformations dans chaque grain vont s'approcher de la déformation globale imposée). Par suite le comportement d'un même grain varie

peu d'une distribution d'orientations à l'autre. Des études adoptant une modélisation plus réaliste de la forme des grains ont été menées, avec des cylindres de section hexagonale pour des calculs quasi-3D [Harren et Asaro, 1989, Becker, 1991], ou avec des cristaux en forme de dodécaèdres rhombiques (arrangement de polyèdres à 12 faces en cube à faces centrées) discrétisés en éléments tétraédriques [Mika et Dawson, 1998, Mika et Dawson, 1999], qui fournissent des résultats sensiblement meilleurs que la forme carrée ou cubique. Afin de connaître les effets dus tant à la forme d'un élément qu'au nombre d'éléments constituant un grain, Mika et Dawson [Mika et Dawson, 1998] ont procédé à une comparaison entre les effets d'interaction de grains prévus avec des éléments cubiques et ceux prévus avec des éléments dodécaédriques. Il en ressort que *(i)* plus un grain dodécaédrique est discrétisé, plus son comportement est dépendant de son orientation au détriment du voisinage, *(ii)* l'effet de voisinage est altéré avec l'utilisation d'éléments cubiques à cause du faible nombre d'interfaces entre grains dans de tels éléments. Cependant la prédiction d'évolution de texture reste valable quelles que soient les formes de cristaux utilisées. Ceci, ajouté aux constatations de Bachu et Kalidindi, suggère que la simple donnée des orientations importe plus que l'arrangement spatial de ces orientations pour la prédiction de propriétés effectives de polycristaux.

Bref, en grandes déformations avec des rotations de réseau cristallins, une modélisation EF en 3D paraît essentielle car elle permet de faire intervenir dans le calcul une accommodation plastique entre grains voisins, qui est absente du modèle de Taylor, et à l'origine de la surestimation des niveaux de contrainte propre à ce modèle [Butler et al., 1998]. Mais pour une telle modélisation EF (prédiction d'évolution de texture) il n'est pas nécessaire de faire figurer la microstructure (géométrie des grains, voisinage réel) de façon réaliste. Il convient tout de même d'éviter les simulations en 2D dans la mesure où les chemins de déformations, produits par des glissements appartenant à un réseau tridimensionnelle, sont eux-mêmes tridimensionnels. Une description du développement de sous-structures de grains par la mesure de la variation de l'orientation cristallographique d'un point à un autre d'un même grain est aussi possible dans des grains suffisamment discrétisés [Mika et Dawson, 1999]. Mais la densité de frontières de désorientation (assimilées aux GNBs) et le nombre de pics d'orientations distincts sur une figure de pôle restent dépendants du nombre d'éléments par grain et la convergence n'a pas été observée dans ces travaux.

I.2.2 Description détaillée de chaque grain

Dans un premier temps ces descriptions de la microstructure réelle d'un polycristal se sont limités à des multicristaux en deux dimensions : [Havlicek et al., 1990, Havlicek et al., 1992, Canova et al., 1992] pour des petites déformations. Les travaux de Teodosiu *et al* et Harder [Teodosiu et al., 1991, Harder, 1999] portent aussi sur de telles configurations de calcul ; leur originalité réside dans les lois de comportement prenant en compte les interactions entre dislocations. On retrouve la prise en compte des densités de dislocations dans la modélisation par EF du comportement d'un multicristal en traction simple effectuée par Delaire *et al* [Delaire et al., 2000]. Il a obtenu une distribution des déformations à l'intérieur des grains semblable à celle mesurée expérimentalement. Le modèle utilisé prévoit un partitionnement des grains en domaines se distinguant par des systèmes actifs différents et un accroissement de la densité de dislocations essentiellement près des grains, malgré la présence d'une bande de localisation de la déformation axiale. Dans la littérature, ces travaux sont les plus avancés concernant la description du comportement intragranulaire au sein d'un multicristal car ils présentent une modélisation en grandes déformations avec la prise en compte, certes avec une loi phénoménologique, de la densité de dislocations.

Afin de s'approcher au mieux de la microstructure réelle d'un matériau hétérogène de manière

systématique, Ghosh et Moorthy ont développé des éléments finis 2D en forme de cellules de Voronoï [Ghosh et Moorthy, 1995, Ghosh et al., 1995] : chaque élément fini est une cellule de Voronoï, comportant pour cela un nombre d'arêtes, une forme et une taille variables d'un élément à l'autre. Cette méthode est séduisante car chaque grain est décrit singulièrement, de manière simple et systématique, mais elle ne permet pas l'étude du comportement intracellulaire et elle reste pour l'heure en 2D.

En résumé :

Parmi les modèles EF, différentes approches pour la représentation microstructurale de l'agrégat sont utilisées : un élément par grain, une forme géométrique unique pour tous les grains du milieu d'étude, représentation en 2D... Ces formes d'approche simplifiées conviennent très bien, comme nous le constatons nous-mêmes dans la suite de ce document, section II.7, pour des prédictions de comportement effectif d'un polycristal ou pour la prédiction d'évolution de texture -pour ce dernier cas d'étude, rappelons qu'un modèle de type Taylor fournit en général des résultats convenables-. Mais les interactions granulaires ainsi que l'accommodation de ces interactions qui se produit à l'intérieur des grains ne peuvent pas être décrits correctement si l'on ne tient pas compte de la microstructure réelle. Pour s'en persuader, nous pouvons consulter tous les travaux portant sur l'étude d'un multicristal à partir de la description réaliste de sa microstructure [Zisman et Rybin, 1998, Havlicek et al., 1990, Havlicek et al., 1992, Teodosiu et al., 1991, Harder, 1999, Delaire et al., 2000] ; tous rapportent des effets de gradients de déformations ou de contraintes aux abords des joints de grains et tout particulièrement près des joints triples. Ainsi les travaux présentés ici apportent-ils une information nouvelle dans l'étude numérique de la plasticité cristalline : non seulement ils portent sur une description 3D réaliste de la morphologie microstructurale d'un *poly*- cristal mais encore ils permettent une analyse des accommodations intragranulaires.

I.3 Aspects expérimentaux, structures de dislocations, effets d'échelle

L'hétérogénéité de comportement dans un polycristal a été relatée dans de nombreux travaux (voir, pour le cas d'un multicristal en traction simple, [Delaire et al., 2000], pour le cas de matériau métalliques biphasés, [Allais et al., 1994]). Comme le signalent Bretheau et Caldemaison [Bretheau et Caldemaison, 1981], les hétérogénéités peuvent être aussi marquées entre grains qu'entre différentes zones d'un même grain (fer ou cuivre).
De telles hétérogénéités sont liées surtout aux différences de comportement élastoviscoplastiques entres grains d'orientations cristallographiques différentes (les hétérogénéités de comportement dans un monocristal ne sont pas si prononcées que dans un polycristal [Forest et Cailletaud, 1995]). Elles conduisent, au cours de l'écrouissage, au développement de microstructures à l'intérieur des grains décrites dans un travail bibliographique par Hansen et Jensen [Hansen et Jensen, 1999]. Ces microstructures sont formées par des frontières de dislocations où les dislocations se sont accumulées, délimitant l'espace en régions à plus faibles densités de dislocations. Cette observation de cellules de dislocations a été reportée dans de nombreux travaux [Swann, 1963, Saada, 1963, Kuhlmann-Wilsdorf et Wilsdorf, 1963, Ungár et al., 1998, Zehetbauer et al., 1999]. Mais

une distinction doit être faites entre deux types de structures de dislocations : *(i)* les dislocations statistiquement stockées observées tant dans les mono- que les poly-cristaux, qui au cours de leur parcours rencontrent d'autres dislocations et s'accumulent ou s'annihilent, et *(ii)* les dislocations géométriquement nécessaires accumulées en des points précis liés à la morphologie du milieu [Cottrell, 1964, Ashby, 1970] : ces dislocations sont nécessaires pour accommoder une déformation non-uniforme, c'est pourquoi on les observe particulièrement dans les polycristaux. Plus récemment, la classification des structures de dislocations s'est précisée, notamment avec la terminologie de Kuhlmann-Wilsdorf et les observations de Liu et Hansen [Kuhlmann-Wilsdorf et Hansen, 1991, Liu et Hansen, 1995] : pendant une déformation à froid d'un métal cfc, des blocs cellulaires ("cell blocks") délimités par des frontières de dislocations ("dislocation boundaries") se forment ; chacun de ces blocs est supposé être déformé par l'activation de moins de cinq systèmes de glissement ; on explique ainsi que la déformation ne puisse y être égale à la déformation macroscopique et par suite que des frontières de dislocations soient nécessaires pour accommoder les déformations. Ces blocs cellulaires sont donc délimités par des frontières géométriquement nécessaires (GNBs) ; leur taille ainsi que l'épaisseur des frontières diminuent avec une déformation croissante [Ungár et al., 1998, Zehetbauer et al., 1999]. Ils sont aussi subdivisés par des frontières de cellules ("cell boundaries") orientées aléatoirement dans les blocs cellulaires (contrairement aux GNBs). Ces frontières de cellules sont supposées être issues d'un piégeage mutuel de dislocations mobiles ; elles ont été appelées "incidental dislocation boundaries" (IDBs) et la désorientation relative d'un coté à l'autre de la frontière est beaucoup plus petite que dans le cas de GNBs [Godfrey et al., 1998]. La subdivision de grain par GNBs (–> blocs cellulaires) et IDBs (–> frontières intracellulaires) a été observée à basse température pour la plupart des métaux cfc à moyenne -ou haute- énergie de faute d'empilement et elle s'est avérée très sensible à la taille de grain et à l'orientation cristallographique. Hansen et Jensen insistent sur la corrélation entre la microstructure formée par les frontières de dislocations (tant GNBs que IDBs) et l'orientation du grain : il est donc envisageable d'introduire une information microstructurale dans les modèles de plasticité cristalline pour décrire la déformation moyenne d'un grain (en petites et grandes déformations). C'est ce que Ortiz, Repetto et Stainier se sont attachés à faire dans leur théorie de plasticité des monocristaux en considérant le développement de sous-structures lamellaires de grains formées par des dislocations [Ortiz et al., 2000].

Dans notre cadre d'étude, nous abordons -certes- une description du comportement intragranulaire mais nous ne pouvons prétendre décrire, même grossièrement, le développement de telles microstructures. Effectivement, la loi de comportement est la même pour chaque point d'un grain. L'hétérogénéité intragranulaire que nous décrivons n'est due qu'aux variations de sollicitation mécanique d'un point à un autre. Cela peut conduire à la prédiction correcte de microstructures de déformation telles que celles intervenant dans la recristallisation, comme l'a montré Bate dans son exposé de l'application de la plasticité cristalline par la méthode des éléments finis à l'échelle intragranulaire [Bate, 1999]. Les modèles de comportement généralisés (ou d'ordre supérieur) peuvent rendre compte du développement de telles microstructures : en retenant les dérivées du second ordre des déplacements pour la description cinématique du milieu, on introduit une dimension homogène à une longueur. La cinématique d'un point dépend alors non seulement de sa position mais aussi des autres points. Ce caractère de non localité permet de décrire un comportement sensible à la présence dans le voisinage d'un joint de grain ou de frontières de dislocations. Parmi les nombreux développements et applications de modèles généralisés : [Fleck et al., 1994, Forest et al., 1997, Forest, 1998, Forest et al., 2000, Shu et Fleck, 1999, Hutchinson, 2000, Acharya et Beaudoin, 2000, Beaudoin et al., 2000]. Ces théories associées aux gradients de déformations sont à distinguer de celle exposée dans [Ortiz et al., 2000]. Dans cette étude récente, l'accommodation

des déformations au voisinage d'obstacles (dislocations, joint de grain, surface ...) ne se traduit pas en termes de gradient de déformation mais est décrite par la construction explicite -et l'équilibrage- de structures de dislocations à chaque incrément de la description du comportement du matériau. Cela permet, comme les modèles non locaux faisant intervenir des longueur caractéristiques, de rendre compte des effets de taille, que ce soit la taille des grains, la taille de l'échantillon testé, la taille de particules. De plus cela permet, contrairement aux modèles à gradient de déformation, de prévoir des structures hétérogènes de déformation permettant d'accommoder une déformation macroscopique uniforme donnée.

Chapitre -II-

Méthode, modèle, outils

Sommaire

II.1 Introduction **13**

II.2 Polycrystal generation **15**

II.2.1 Models of random polycrystals 15

II.2.2 Construction of Voronoï polyhedra on a grid of points 16

II.2.3 Extensions of the model and results 17

II.3 Model for the Single- and Polycrystal **19**

II.3.1 Single Crystal 19

II.3.2 Transition rules for the polycrystal 20

II.4 Numerical implementation **22**

II.4.1 Integration of the constitutive equations 22

II.4.2 Parallel computation 23

II.4.3 Representation of the RVE 24

II.5 Validation of the numerical model **25**

II.5.1 Construction of the aggregate 25

II.5.2 Influence of the geometry and of the texture 27

II.5.3 Influence of the element interpolation 27

II.5.4 Influence of the size of the mesh 31

II.5.5 Comparaison de la réponse EF avec la réponse homogénéisée d'un milieu biphasé élastique 32

II.5.6 Influence du nombre d'éléments sur la réponse effective d'un milieu biphasé élastique 32

II.5.7 Influence du nombre d'éléments et de grains sur la réponse effective en élasticité hétérogène 32

II.5.8 Influence du nombre d'éléments sur la réponse moyenne par grain . . 36

II.5.9 Influence du nombre d'éléments sur la réponse locale 38

II.5.10 Local comparison with the self–consistent model 40

II.6 Conclusion **40**

II.7 Résumé des possibilités offertes par la méthode et les modèles 41

Dans le premier chapitre nous présentons des modèles de référence pour la description du comportement des matériaux métalliques à différentes échelles. Les échelles auxquelles sont prises en compte les phénomènes physiques conditionnent les échelles de représentation. Ainsi ne peut-on pas [encore] prétendre modéliser un volume macroscopique en tenant compte du comportement à l'échelle atomique. La revue bibliographique permet donc de situer les différentes échelles abordables par modélisation et de connaître les phénomènes physiques qui sont -ou ne sont pas- retenus dans ces modélisations.

Ce chapitre est consacré d'une part à la présentation des différents 'outils' de notre méthode (modèle de comportement de mono- et de polycristal en élastoviscoplasticité, génération de milieu polycristallin synthétique, représentation d'un polycrystal et résolution par la méthode éléments finis), d'autre part à la sensibilité de la méthode aux paramêtres et conditions de calcul (nombre d'éléments, nombre de grains, orientations cristallographiques, réalisation de microstructure ...). Ceci a fait l'objet d'un premier article rédigé en 1999 pour *International Journal of Plasticity*. Il a été accepté pour publication dans sa forme finale révisée en mai 2000, puis publié en avril 2001 (Vol. 17/4, pp. 513-536). Ce chapitre est constitué de ce premier article -en anglais- et de compléments -en français- pour la détermination des conditions de validité des outils (influence du nombre d'éléments en élasticité et en viscoplasticité, influence du nombre de grains en élasticité).

Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates.
Part 1 : F.E. model

Fabrice Barbe[a], Luc Decker[b], Dominique Jeulin[b], Georges Cailletaud[a,*]

[a] *Centre des Matériaux/UMR 7633, Ecole des Mines de Paris/CNRS, BP87, F-91003 EVRY, France*
[b] *Centre de Morphologie Mathématique, Ecole des Mines de Paris, 35 rue Saint-Honoré, F-77305 FONTAINEBLEAU, France*

Abstract
The constitutive equations currently used for metallic materials are written on a macroscopic scale, using macroscopic criteria and internal stresses to represent hardening. The granular nature of the material is then not represented. Since it may be critical in some cases, many attempts have already been made to account for it. So a series of modeling have been made in the framework of models having uniform stress or strain in each (crystallographic) phase. As a result, each crystallographic orientation has a different stress-strain state, but the actual microstructure is generally not introduced (Taylor model, self–consistent approach), so that the heterogenity obtained is not realistic. The aim of this work is to have a better evaluation of the heterogenity of stress and strain fields in realistic polycrystalline aggregates. For that purpose, an aggregate model is generated, and computed by Finite Element technique. The paper is presented in two parts, the first one being devoted to the description of the numerical tools, the second one showing the results at different scales.
The present part includes the description of the 3D generator of microstructures, able to define any number of grains in a given 3D volume, with arbitrary shapes, and with a monitoring of the volume fraction of each phase. The result of this code will be taken as a starting point of the modeling, which is performed with a crystallographic model implemented in a parallel

Finite Element code. Typical validation results are shown, with convergence data, on the size of the meshes and on the geometrical realisations of aggregates.

Keywords: microstructures (A); crystal plasticity (B); inhomogeneous material (B); polycrystalline material (B); finite element (C)

* Corresponding author: G. Cailletaud;
tel.: 33 1 60 76 30 56; fax: 33 1 60 76 31 50; e-mail: gc@mat.ensmp.fr

II.1 Introduction

Classical mechanical models are built after introducing the concept of Representative Volume Element (RVE). The polycrystalline RVE is a material piece which must include a "sufficient" number of grains, in terms of crystallographic orientation, shape and size. The size of the RVE will depend of course on the typical lengths of the microstructure, and on the statistical distribution of the properties. In this case, a unique strain tensor and a unique stress tensor represent the material, forgetting on a *macroscale* the effect of the heterogenities. Authors usually refer to this type of stress as level 1 stress field. Level 2 corresponds to the mean value in a given phase of the material, which can be measured by X–ray diffraction with a spot including many grains, level 3 to the local value inside each grain, accounting for transgranular gradients.

Having access to the variation of the strain and stress fields on a microscale (level 3) can be useful for understanding the plasticity mechanisms and the crack initiation process. It has to be noted that the microstructural observations made by SEM or TEM concern this level. The aim of this paper is then to generate a realistic 3D grain morphology and to apply constitutive equations describing crystal plasticity in each grain, by means of a finite element code, to characterise the heterogenity of these fields. This first approach concerns only spherical grain shapes, with only one chemical phase in each grain. The crystallographic orientation is the only character defining a "phase", and we will use isotropic textures, loaded in small deformations. Due to the neighborhood effect, two grains belonging to the same crystallographic class can have a different response. In the computations, it is assumed that the local behavior is uniform in each grain. On the other hand, a large number of degrees of freedom are introduced to account for the strong gradients in the grains. Having in hand these types of results, one can be interested in several types of analyses:
- global volume average produces stress–strain curve on the RVE (level 1);
- volume average on each phase (i.e. each set of grains belonging to the same crystallographic orientation class) produces local information which can be compared to Taylor or self–consistent approach (level 2). This analysis preserves the constitutive equations of each phase, but "forgets" the neighborhood effect;
- volume average on each individual grain gives some information at an intermediate scale, where the effect of the real morphology is present, but not the transgranular fields (no grain boundary effect);
- the local analysis of the stress and strain field is the only one which preserves both the local behavior and the local load balance, and which can give a realistic evaluation of the heterogenity inside the material.

The F.E. analysis of crystalline solids is now classical in the literature. The constitutive equations used can describe either single crystal or polycrystal behavior. The case of the single crystal can

be considered to investigate the local behavior of bicrystalline specimens [Méric et al., 1994] or multicrystalline specimens with a low number of grains [Havlicek et al., 1990, Teodosiu et al., 1991, Havlicek et al., 1992, Yao et Wagoner, 1993, Becker et Panchanadeeswaran, 1995, Harder, 1999]. An intense activity can be expected in this field for the next decade, since it is now possible to get local strain fields (instead of discrete measurements) from the experimental observations. Another possible application of this type of computation is to deduce the global behavior of a polycrystal from elementary behavior of its grains. This type of application started more than 20 years ago [Gotoh, 1978, Engel, 1978]. Since intensive computational resources are needed to achieve the computation, the field is still very active. Most of the time, the papers concern computations of polycrystals at large strains. Several types of meshes have been used by the authors. Many papers simply introduce a squared or a cubic mesh, each element corresponding to a different crystallographic orientation [Kalidindi et al., 1992, Havlicek et al., 1992, Takahashi et al., 1994, Beaudoin et al., 1995, Dawson et Marin, 1998, Takahashi et al., 1998, Bertram et al., 1998, Bachu et Kalidindi, 1998]. This method is convenient to provide results concerning the global response of the aggregate. Still, it cannot provide any information on the local behavior, and has nothing to do with the real microstructure. A more precise modeling of the grain shape has also been proposed, with cylinders having a hexagonal section in quasi-3D computations [Harren et Asaro, 1989,Becker, 1991], or dodecahedra [Mika et Dawson, 1999]. This approach has allowed the authors to investigate the local behavior at a transgranular level.

The viscoplastic approach proposed by Asaro [Asaro, 1983] is the most common model used for the single crystal with a simple interaction matrix, which is often reduced to a Taylor assumption (isotropic hardening) [Becker, 1991, Beaudoin et al., 1993, Mika et Dawson, 1998, Mika et Dawson, 1999, Staroselski et Anand, 1998]. More complex models, considering the dislocation-dislocation interaction, have also been used [Teodosiu et al., 1991, Harder, 1999]. To account for anisotropic effects of the hardening in the slip systems, self–hardening and latent–hardening of the slip system resistances can be used [Bachu et Kalidindi, 1998]. Kinematic hardening can be seen to simulate cyclic– and cross–loading tests [Takahashi et al., 1998]. As well, twin has been introduced [Staroselski et Anand, 1998] to model the behavior of materials with low stacking fault energy like α -brass. In this case, latent hardening laws have been used for slip and twin resistance.

The original points of the present paper is first to consider 3D realistic morphologies, then to use a specific crystallographic model accounting for viscoplasticity, isotropic and kinematic hardening, and to focus on the small strain levels. At this stage of the deformation, the redistribution effect is already present, but not saturated, so that it is possible to compare the F.E. results with sophisticated models like self–consistent approach instead of considering a Taylor model. Besides, a detailed analysis of the intragranular level will be proposed.

In a recent paper [Quilici et Cailletaud, 1999], a brief presentation of the methodology was made, and initial results concerning the behavior in the core of the material were given. A comprehensive description of the methods has now been given, the second part of the paper [Barbe et al., 2001b] being devoted to the study of the intragranular contours and the surface effect.

The first section of the present part describes the numerical tools used to generate a polycrystalline aggregate. Later the models for single crystal and polycrystal plasticity are presented. The section II.3 provides a description of the numerical aspects of the model implementation, including both the parallel F.E. code and the small simulation code for the equivalent polycrystal model. In order to illustrate the influence of the numerical parameters of major importance in the definition of

a polycrystal, several realisations, either with geometrical variations on the morphology of the microstructure or with different sets of textures, are presented in section II.4. Afterwards, Section II.5 is devoted to the study of the convergence of the simulations with respect to the discretisation used, in terms of macroscopic responses compared to the responses of a homogenisation model.

II.2 Polycrystal generation

II.2.1 Models of random polycrystals

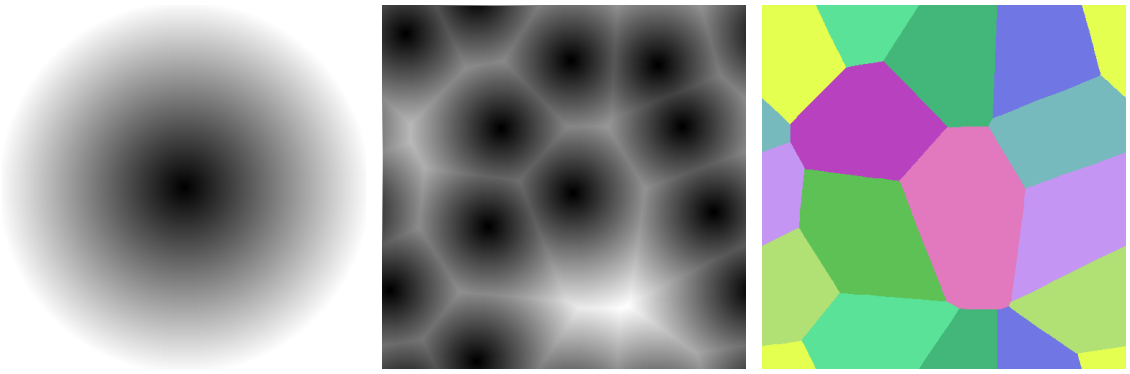
To account for the heterogenity of polycrystalline structures, a model of random medium, namely of random tesselation, has to be used. Every class of the tesselation will reproduce a metallic grain with a given crystallographic orientation and/or mechanical constitutive equations, according to the definition of phases in this paper.

The Voronoï polyhedra model [Gilbert, 1962] is a good candidate to generate random polycrystals, for geometrical considerations, since it provides planar boundaries separating grains, and because it reproduces some morphogenetic process, where germs grow with a constant and isotropic growth rate from random seeds. It was already used by Canova et al. [Canova et al., 1992] in its standard version and with a limited number of crystals (100 in the mentionned reference). A more general model, reproducing germination and growth models is provided by the Johnson-Mehl model [Johnson et Mehl, 1939], which can be simulated with slight changes of the present algorithm. To generate such microstructures, we propose an original method, with numerous extensions of the classical model [Decker et Jeulin, 2000]. Its main advantages, as compared to standard procedures, is to be able to generate texture with very large number of grains with a low computational cost, as explained below. Formally, Voronoï polyhedra are defined as zones of influence of a particular set of points, corresponding to their centers. Let $D \subset R^3$, and $E = \{A_i\}$ be a set of N random points $P(x,y,z)$ corresponding to the centers of grains in the continuous domain D. If $d(P_1,P_2)$ is the euclidean distance beween two points P_1 et P_2, the zone of influence of a point A_i is defined in (II.1) by the set of points $P(x,y,z)$ with:

$$iz(A_i) = \left\{P(x,y,z) \in D \quad | \quad d(P,A_i) < d(P,A_j) \quad \forall j \neq i\right\} \tag{II.1}$$

In more physical terms, a point P belongs to the zone of influence of germ A_i, if it is closer to A_i than to any other germ. By construction, this zone of influence generates the Voronoï polyhedron centered in A_i. The set of zones of influence $\{iz(A_i)\}$ builds a random tesselation of the domain D into N classes, every A_i being the germ of one class.

Centers of polyhedra are usually obtained by simulating a Poisson point process, resulting into a uniform location inside the domain D (their coordinates are obtained as independent uniform random variables). Other distributions of germs can be simulated, as illustrated below. Polyhedra are immediately known from their boundaries (or faces), resulting from intersections of median planes of all segments connecting nearest neighbors (A_i, A_j). Building polyhedra with a common face is equivalent to looking for the solution of the dual problem of the Delaunay graph connecting the center of any polyhedron to the centers of its neighbors. In three dimensions, the determination of the solution of this problem by means of computational geometry is rather prohibitive when the number of germs N is larger than a few hundreds. Therefore, we have proposed a new approach.



a) Distance function of a single point source

b) Distance function of a set of point sources

c) Final result after construction and labelling

Figure II.1 : Construction of Voronoï polyhedra on a periodic grid (2D example)

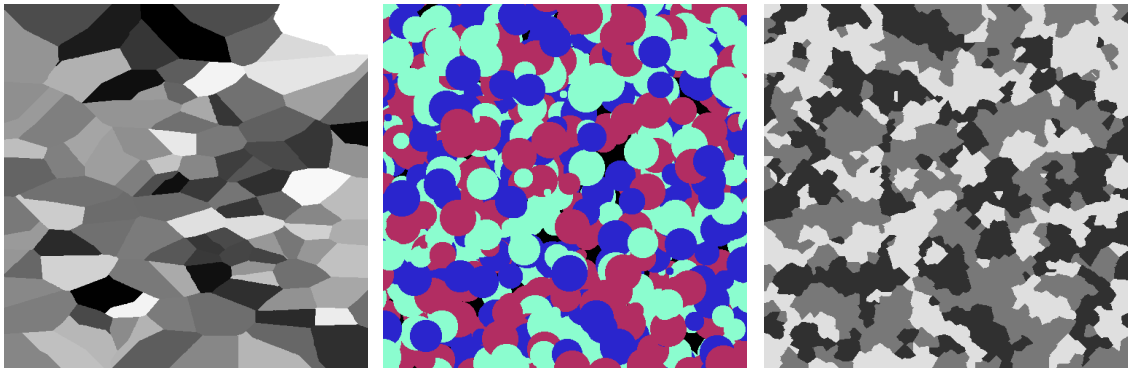
II.2.2 Construction of Voronoï polyhedra on a grid of points

A specific procedure was developed to build Voronoï polyhedra inside a discrete domain, made of a 3D voxel map. The polyhedra are generated at a given resolution, defined by the size of the three-dimensional domain. We have to assign to each voxel the number (or label) of the grain to which it belongs. The generation of polyhedra is therefore obtained with a given spatial resolution, according to the size of the resulting image. For a given size, the precision of the definition of grain boundaries depends on their average volume, and, as a consequence, on the number of grains.

In a first step, a germination process gives the locations (on the grid) of the centers of grains. Then the Euclidean distance function of this set of points [Gratin, 1992, Gratin, 1993] is calculated from an isotropic propagation starting from points. This process can be interpreted as a growth starting from every germ. The result can be displayed as a grey level image where the value in each point is proportional to the distance to the nearest source. This is illustrated in fig. II.1a for the case of a single source and in fig. II.1b for a set of point sources. The calculation of the distance function is implemented in a very efficient way, using the hierarchical queues algorithm [Meyer, 1990, Gratin et Meyer, 1992, Gratin, 1993, Ragnemalm, 1992], which enables us to produce simulations in a short time. The memory space needed for simulations is reasonable, although an intermediary 3D image with floating data is required (63 Mb are used for a domain with 180^3 voxels). The boundaries of polyhedra (as in fig. II.1c) can be obtained by two different ways. In the first method, the image of distances is considered as a topographical relief and the grain boundaries are obtained as the divide surfaces of the watersheds (a watershed being associated to each center). They are built by the "relief immersion" algorithm [Meyer et Beucher, 1990, Meyer, 1992]. In the second method, the boundaries are obtained during the step of the calculation of the distance, if any voxel is assigned the label of its closest source.

This construction can be a first step in an analytical construction of polyhedra, using information on neighboring grains contained in the discrete 3D image. The calculation of intersection of planes is then obtained easily and it is possible to obtain coordinates of vertices of polyhedra, from which a finite element mesh may be generated. In the present paper, the mesh is made of a network of cubes as in [Canova et al., 1992].

Times to generate random tesselations are short, and can be neglected as compared to finite element calculations. The complexity of calculation is practically proportional to the number of voxels (and does not depend on the number of polyhedra). For indication, using a PC computer



(a) Anisotropic grains obtained by deformation of the distance function.

(b) Assignation of a phase to each grain (right) from a realisation of a random multiphase dead-leaves model (left)

Figure II.2 : Extension of the model

with the Linux OS (133 MHz, 64Mb memory), 200 seconds are required to produce a cubic domain with 180^3 voxels, containing 1000 as well as 3000 polyhedra.

II.2.3 Extensions of the model and results

The proposed method can be easily extended. Periodic boundary conditions can be imposed, as in fig. II.1b,c: the vicinity graph of the grid is simply made periodic before the calculations. Edge effects are suppressed by this process, and infinite media can be simulated. This type of periodic simulation is very useful for further finite element computations with periodic boundary conditions.

Grain shape anisotropy can be generated from any deformation of the distance function (fig. II.2a). Thus are reproduced structures as obtained by a rolling process. Notice that it would be difficult to generate such anisotropic textures from standard computational geometry procedures, since a Poisson point process remains Poisson (and therefore isotropic) after any transformation of coordinates by affine transformations. Our construction based on distance function does not present this drawback. If a phase, or a component, is randomly assigned to each grain according to a given distribution, a multiphase polycrystal is generated. The assignation can be made uniform over space, or can be made according to an underlying random medium. In the last case, the phases are assigned non independently to the different polyhedra. This is obtained by assigning to every center a color (or label) according to a map generated by a second image. The color of any germ is then assigned to every voxel of the polyhedron that it generates. This differs from standard simulations, where the assignation of grains is made randomly, and independently for any pair of grains. An example is provided in fig. II.2b, where the map was produced by the simulation of a color dead-leaves model [Jeulin, 1989], while in fig. II.3 the phases are assigned without any spatial correlation.

Finally, the distribution of grains can be made more regular, as compared to the standard Voronoï model: a minimal distance r between centers can be introduced, or more generally, a repulsion kernel (containing no other germ) can be given around every point of the process. In the last case, the location of centers is made sequentially, using an additional 3D image which records the forbidden locations. In this way, grains with a low size are eliminated and the distribution of the

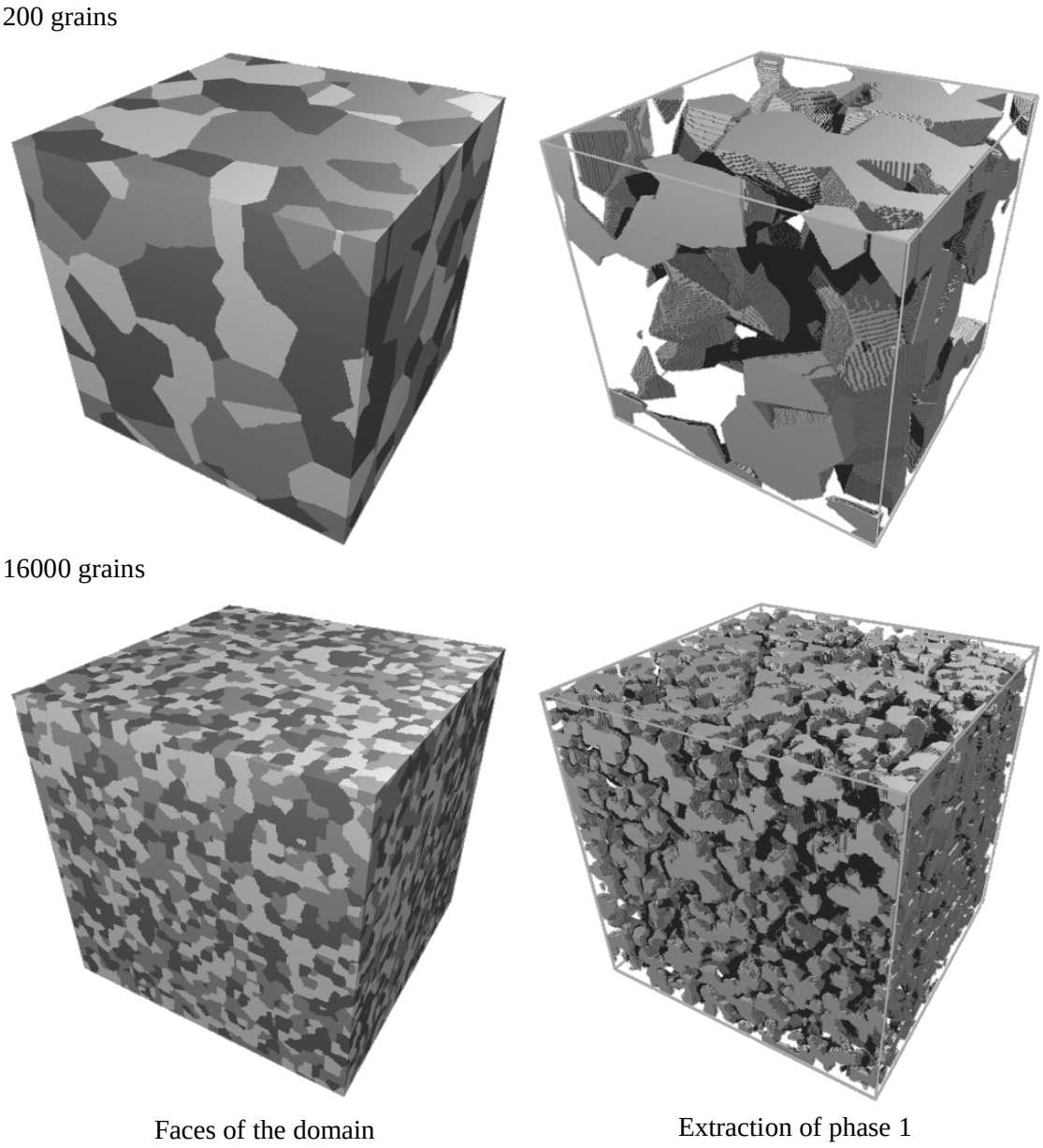
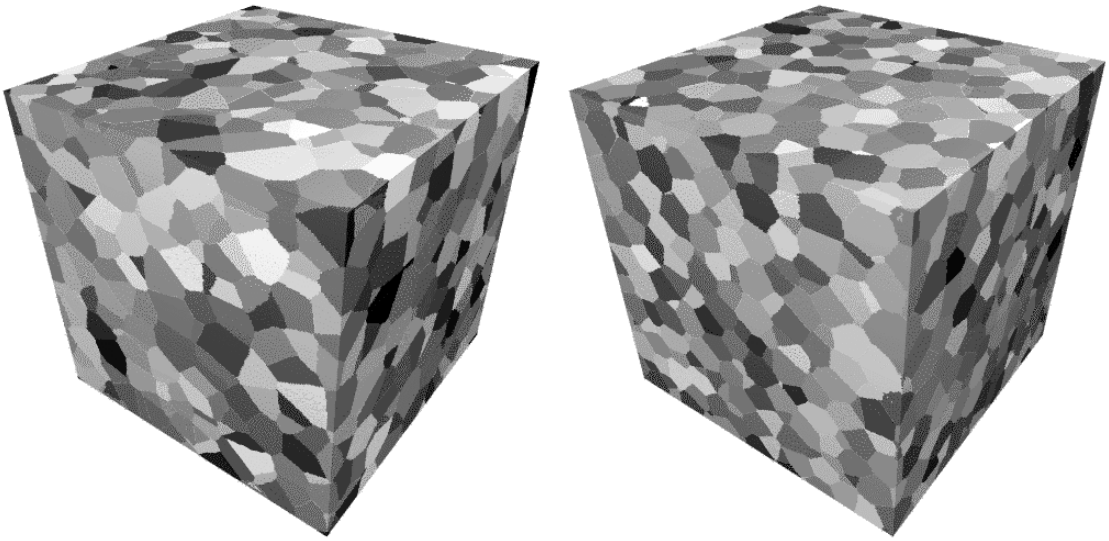


Figure II.3 : Two-scale simulations of multiphase polycrystals. Grains are uniformly distributed over three phases, independently on each grain. Cubic domain (250^3 voxels) with periodic boundary conditions. A different grey level is assigned to each phase.



1000 grains on a Poisson point process

1400 grains located with a repulsion (sphere with radius $r = 20$)

Figure II.4 : Voronoï polyhedra: display of faces of a cubic domain (250^3 voxels) with periodic boundary conditions. A random grey level is assigned to each grain.

grain volumes is made much more uniform (fig. II.4b), as compared to the purely random case (fig. II.4a). This is interesting for investigating the effect of the dispersion of the grain volumes on the behavior of polycrystals.

II.3 Model for the Single- and Polycrystal

II.3.1 Single Crystal

It is assumed that slip is the predominant deformation mechanism and that Schmid's law is valid. The resolved shear stress can then be used as a critical variable to evaluate the inelastic flow. A viscoplastic framework is chosen, in order to avoid the problems related with the determination of the active slip systems in plastic models. A threshold is introduced both in positive and negative directions on each slip system : twelve octahedral slip systems will be used for FCC materials. Two variables are defined for each slip system s, r^s and x^s, corresponding respectively to isotropic hardening (expansion of the elastic domain), and kinematic hardening (translation of the elastic domain). A system will be active provided its resolved shear stress τ^s is greater than $x^s + r^s$ or less than $x^s - r^s$ and the slip rate will be known as long as stress and the hardening variables are known. The state variables used to define the evolution of r^s and x^s are the accumulated slip v^s for isotropic hardening and the variable α^s for kinematic hardening. Knowing the stress tensor applied to the grain g, $\underset{\sim}{\sigma}^g$ the resolved shear stress for system s can be classically written according to (II.2), $\vec{n}^s$ and $\vec{m}^s$ being respectively, for the system s, the normal to the slip plane and the slip direction in this plane. The hardening variables x^s and r^s can then be expressed as a function of α^s and v^s following (II.3), their actual values allowing then to compute the viscoplastic slip rate $\dot{\gamma}^s$, the viscoplastic strain rate tensor $\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^g$ (II.4), and the hardening rules ((II.5) and (II.6)). The present formulation gives a saturation of the hardening

in both monotonic and cyclic loading, and takes into account the interactions between the slip systems, through matrix h_{rs}, as in [Kocks et Brown, 1966]. Nine material-dependent coefficients are involved in the model $(E, \nu, K, n, c, d, R_0, Q, b)$.

$$\tau^s = \underset{\sim}{\sigma}^g : \underset{\sim}{m}^s = \frac{1}{2}\underset{\sim}{\sigma}^g : (\vec{n}^s \otimes \vec{m}^s + \vec{m}^s \otimes \vec{n}^s) \tag{II.2}$$

$$x^s = c\,\alpha^s \quad ; \quad r^s = R_0 + Q\sum_r h_{rs}\left\{1 - e^{-bv^r}\right\} \tag{II.3}$$

$$\dot{\gamma}^s = \dot{v}^s\, sign\,(\tau^s - x^s) \quad ; \quad \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^g = \sum_s \underset{\sim}{m}^s \dot{\gamma}^s \tag{II.4}$$

$$\dot{v}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s}{K} \right\rangle^n \quad \text{with } \langle x \rangle = Max(x, 0) \quad \text{and} \quad v^s(t = t_0) = 0 \tag{II.5}$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\,\alpha^s \dot{v}^s \quad \text{with} \quad \alpha^s(t = t_0) = 0 \tag{II.6}$$

Such a formulation [Cailletaud, 1987, Méric et al., 1991] is an extension of the classical crystallographic approach for single crystal modeling in plasticity or in viscoplasticity (see for instance [Taylor, 1938, Mandel, 1965, Asaro, 1983]). Other more recent models belong to the same class, they were also developed in the eighties [Swanson et Bill, 1985, Jordan et Walker, 1984, Dame et Stouffer, 1986, Busso, 1990] to correctly represent the stress-strain behavior of superalloy single crystals. Due to the saturation of the hardening and the presence of kinematic hardening, the present model is valid for the simulation of cyclic loadings. It has been extensively used for single crystal modeling including Finite Element simulations.

II.3.2 Transition rules for the polycrystal

In a polycrystalline aggregate, one phase may be characterised by its shape, size, crystallographic orientation, location with respect to the surface of the material, *etc* ... Most of the models usually specified for polycrystals made of equiaxial grains retain only the crystallographic orientation [Beaudoin et al., 1993, Staroselski et Anand, 1998, Mika et Dawson, 1999], and put in the same *crystallographic phase* all the grains having the same orientation. The alloy is then considered as a n–phase material, each phase being defined by a set of Euler angles, and the model will then be used to describe the mean behavior of all of them.

The oldest models proposed to obtain local stress and strain in plasticity use simple assumptions like (*i*) uniform plastic strain [Taylor, 1938], (*ii*) uniform stress, (*iii*) uniform total strain [Lin, 1957]. Nevertheless, it is generally admitted that, for the case of polycrystals, the self–consistent scheme is a good candidate to schematically represent the phase interaction. The application in plasticity has been developed by Hill [Hill, 1965], after the work done by Kröner on the elastic accommodation [Kröner, 1961] or Budiansky and Wu ([Budianski et Wu, 1962]) who applied Eshelby solution for the problem of an ellipsoidal inclusion in an infinite medium [Eshelby, 1957]. The case of viscoplastic behavior was treated by Hutchinson [Hutchinson, 1966]. The problem can be written in terms of rates, allowing the computation of the local stresses $\underset{\sim}{\sigma}^g$ if the global stresses and strains and the local strain are known (II.7), by means of a fourth-order tensor $\underset{\approx}{L}^*$ (II.8):

$$\underset{\sim}{\dot{\sigma}}^g = \underset{\sim}{\dot{\sigma}} + \underset{\approx}{L}^* : (\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}} - \underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}^g) \tag{II.7}$$

$$\text{with : } \underset{\approx}{L} = \frac{1}{V}\sum_V \underset{\approx}{L}^g : (\underset{\approx}{L}^* + \underset{\approx}{L}^g)^{-1} : (\underset{\approx}{L}^* + \underset{\approx}{L}) \tag{II.8}$$

where $\underset{\approx}{L}$ characterises the incremental behavior of the equivalent medium, and $\underset{\approx}{l}^{g}$ the tangent behavior of each grain. If elasticity is uniform, the same model is valid with the local and macroscopic plastic strains. On the other hand, in the case of spherical phases, isochoric plasticity and proportional loading path, the model has a simplified expression [Berveiller et Zaoui, 1979]. The relation (II.9) summarises the results given by several models, according to the definition of α, with a specific mention to $\alpha = 1$ [Kröner, 1961], or to (II.10) involving the overall equivalent stress Σ in uniaxial tension and the equivalent plastic strain p deduced from the overall plastic strain tensor $\underset{\sim}{E}^{\mathrm{p}}$ [Berveiller et Zaoui, 1979]:

$$\underset{\sim}{\sigma}^{g} = \underset{\sim}{\sigma} + \mu\alpha\left(\underset{\sim}{E}^{\mathrm{p}} - \underset{\sim}{\varepsilon}^{\mathrm{p}\,g}\right) \tag{II.9}$$

$$\text{with:} \quad \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3\mu p}{2\Sigma}\ , \ p = \left(\frac{2}{3}\underset{\sim}{E}^{\mathrm{p}} : \underset{\sim}{E}^{\mathrm{p}}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{and} \quad \underset{\sim}{E}^{\mathrm{p}} = <\underset{\sim}{\varepsilon}^{\mathrm{p}\,g}> \tag{II.10}$$

From a physical point of view, the previous rule simply shows that a local plastic strain decreases the local stress, whereas the stress redistribution related to plastic accommodation tends to decrease for larger plastic strains. Many other works having used transition rules for polycrystal can be referenced [Beradai et al., 1987, Weng, 1987, Weng, 1993, Hess, 1993]. The transition can also be expressed by a phenomenological model, and identified from Finite Element computation [Cailletaud et Pilvin, 1994, Pilvin, 1996]:

$$\underset{\sim}{\sigma}^{g} = \underset{\sim}{\sigma} + \mu\left(\underset{\sim}{\beta} - \underset{\sim}{\beta}^{g}\right) \tag{II.11}$$

The new variable $\underset{\sim}{\beta}^{g}$ has a non linear evolution, depending on the local plastic strain in grain g, and $\underset{\sim}{\beta}$ is its mean value for the aggregate. This approach can be easily calibrated for complex cyclic loadings. Nevertheless, additional coefficients have to be introduced, which are not necessary in (II.9). Since the loading path in the present paper is just a tension, Berveiller–Zaoui model (BZ) will be chosen as the reference for the polycrystal behavior. The following coefficients are then used:

- isotropic elastic behavior: $E = 196000 MPa$, $\nu = 0.3$
- viscous effect in (II.5) and (II.6): $K = 10 MPa.s^{1/n}$, $n = 25$
- kinematic hardening in (II.3): $c = 1600 MPa$, $d = 40$
- isotropic hardening in (II.3) and (II.4): $R_0 = 111 MPa$, $Q = 35 MPa$, $b = 7$

= =

Les résultats présentés dans ce document portent sur le comportement en élastoplasticité de polycristaux en INCO600, zinc et cuivre. L'INCO600 fait l'objet des 2 articles inclus au document, dont les paramètres sont présentés ci-dessus. Pour chaque matériau, les paramètres de viscosité K et n (II.5) ont été établis de telle sorte que l'écrouissage soit très peu sensible à la vitesse de chargement. L'INCO600 a été choisi car nous disposions des paramètres identifiés dans le travail de Frank Eberl [Eberl, 1999]. Le zinc convient bien à l'étude d'un matériau dont l'hétérogénéité d'élasticité est très marquée (voir l'application faites avec un chargement hydrostatique en section III.6.2). Le cuivre offre l'avantage de présenter un écrouissage important (la contrainte continue à augmenter considérablement au cours de la déformation plastique, contrairement à l'INCO600), aussi a-t-il été choisi pour étudier l'effet de taille relative de grain, effet susceptible de s'accentuer au cours de la déformation plastique. Voici les paramètres de lois de comportement

que nous avons retenus pour ces deux derniers :

(**zinc**, $c/a = 1.856$)
- élasticité isotrope transverse : (MPa) $C_{1111} = C_{2222} = 165000$, $C_{3333} = 61800$, $C_{1212} = 66950$, $C_{2323} = C_{3131} = 39600$, $C_{1122} = 31100$, $C_{2233} = C_{3311} = 50000$
- viscosité du basal : $K = 220 MPa.s^{1/n}$, $n = 4.5$
- écrouissage isotrope du basal : $R_0 = 4MPa$, $Q = 4MPa$, $b = 3$, $h_1 = 1$, $h_2 = 2$
- viscosité du prismatique : $K = 5MPa.s^{1/n}$, $n = 4.5$
- écrouissage isotrope du prismatique : $R_0 = 22MPa$, $Q = 30MPa$, $b = 50$, $h_1 = 1$, $h_2 = 5$
- viscosité du pyramidalPi2 : $K = 5MPa.s^{1/n}$, $n = 4.5$
- écrouissage isotrope du pyramidalPi2 : $R_0 = 17MPa$, $Q = 30MPa$, $b = 50$, $h_1 = 1$, $h_2 = 5$

(**cuivre**)
- élasticité cubique : (MPa) $C_{1111} = 159300$, $C_{1122} = 121945$, $C_{1212} = 80943$
- viscosité : $K = 1MPa.s^{1/n}$, $n = 15$
- écrouissage isotrope : $R_0 = 1.5MPa$, $Q = 3.623MPa$, $b = 1.618$, $h_1 = 1$, $h_2 = 4.4$, $h_3 = h_4 = h_5 = 4.75$, $h_6 = 5$
- écrouissage cinematique : $c = 3402MPa$, $d = 3597$

= =

II.4 Numerical implementation

II.4.1 Integration of the constitutive equations

The crystal plasticity models are implemented in the F.E. code ZéBuLoN, written in C++ [Besson et Foerch, 1998]. Many constitutive equations are implemented in this code; from a numerical point of view, the crystal plasticity models can be considered as classical macroscopic models [Besson et al., 1998]. For the single crystal, the state variables retained for the integration of the constitutive equations are the elastic strain tensor, the accumulated slip v^s and the kinematic variable α^s on each slip system. In the case of a FCC single crystal, 12 slip systems are considered, so that there are $(6 + 2 \times 12)$ variables for each Gauss point. For the polycrystal, a variable defining the intergranular hardening has also to be considered (either $\underset{\sim}{\varepsilon}^{p\,g}$ used in (II.9) or $\underset{\sim}{\beta}^{g}$ introduced in (II.11), depending on the scale transition rule), so that, for P FCC grains, the number of variables is $(6 + 6 \times P + 2 \times 12 \times P)$. The integration of the system is made by means of a theta–method, solved with a local Newton problem, for the models with a low number of variables (less than 100), but the code switches to Runge–Kutta methods for a large number of variables (using $P = 200$ leads for instance to 6006 variables on each integration point). The consistent tangent matrix is obtained numerically in the Newton solution of the theta–method problem [Simo et Taylor, 1985, Cailletaud et Chaboche, 1996], and a BFGS algorithm is used at the global level together with the Runge–Kutta integration.

It has to be noted that the code has two original capabilities to applied loading paths on RVE's:
- a special RVE element, in which the degrees of freedom are the components of the strain tensor, and the reactions the stresses (the matrix [B] of the derivative of the shape functions is simply identity). This element can be included in a F.E. computation, but the calculations are about 10 times faster than the corresponding computations with a regular finite element.

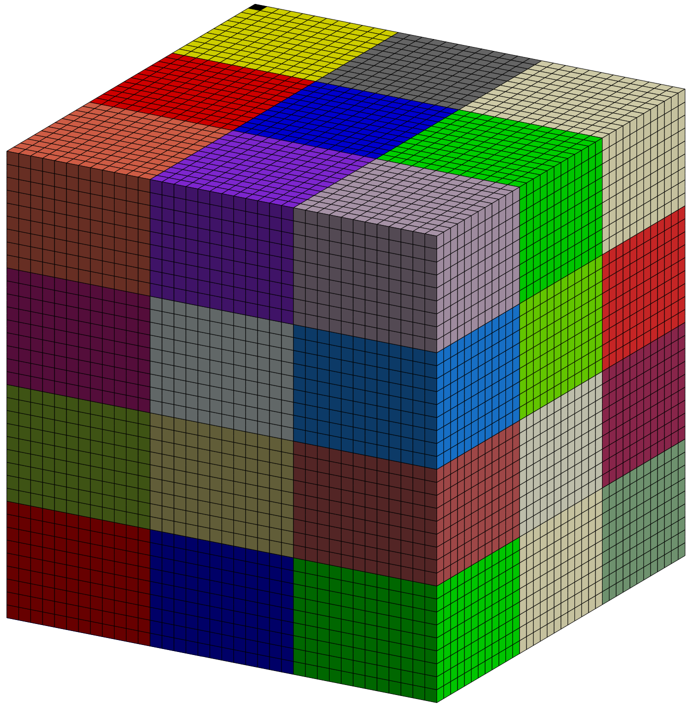


Figure II.5 : Décomposition d'un cube à $36 \times 36 \times 36$ éléments en 36 sous-domaines

- a simulator [ZSeT/ZéBuLoN-8, 1999] which consists in an independent piece of code acting on the material library, and with a fast numerical treatment of the loading (strain partition between elastic and plastic strain), so that the CPU time is again 10 times smaller than with the RVE element.
These capabilities are used to calibrate the material parameters, inside an optimisation loop, or simply to make the simulation, as in the present case: the reference tensile curves made with the self–consistent polycrystal model are produced with the RVE element.

II.4.2 Parallel computation

Many time-steps are needed, since the local loading paths are highly non-proportional. As the global problem is quite large for a single workstation, the parallel version of the code is used [Feyel et al., 1997, Feyel, 1998]. The solution of the system is obtained by subdomains, with the FETI method [Fahrat et Roux, 1994] and the interprocessor communications are managed by use of the PVM or MPI libraries. The jobs are performed on an IBM-SP2 11-node parallel computer.

= =

En complément de ces explications brèves sur la parallélisation du problème, nous présentons sur la figure II.5 un cube constitué de $36 \times 36 \times 36$ éléments, découpé en 36 sous-domaines réguliers (de même taille, forme et orientation). Cette taille de structure n'a pas été abordée dans le cadre de l'article, nous ne la montrons qu'à titre d'illustration du principe de décomposition : un découpage régulier permet d'affecter la même charge de travail à chaque processeur en charge d'un sous-domaine. Ainsi les taches esclaves sont effectuées presque à la même vitesse et le temps perdu par les processeurs à attendre que tous les sous-domaines aient été traités est presque nul. Le découpage avec des interfaces planes tel qu'il est présenté permet de minimiser le nombre de degrés de liberté à l'interface donc le nombre d'équations d'équilibre supplémentaires par rapport à un calcul séquentiel. L'équilibre condensé à l'interface est résolu par la méthode itérative du gra-

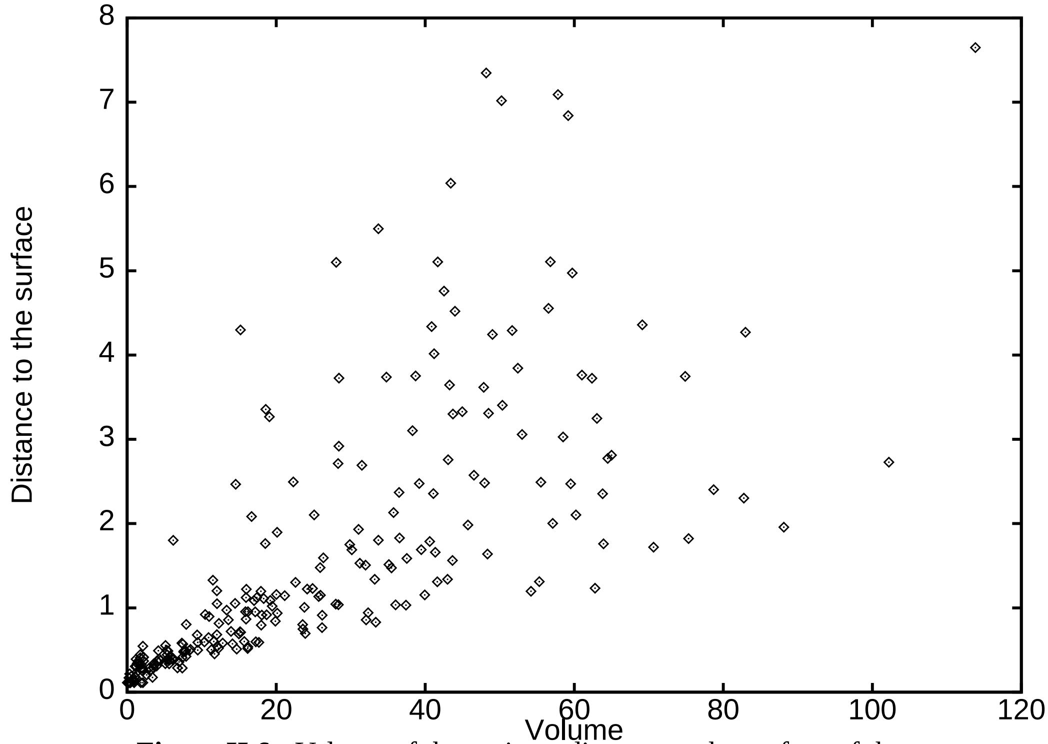


Figure II.6 : Volume of the grain *vs* distance to the surface of the aggregate

dient conjugué. Pour le type de problèmes qui nous intéressent (géométrie simple de la structure, maillage régulier, régime des petites déformations), la matrice globale est assez bien conditionnée sur chaque sous-domaine et FETI converge en général en une centaine d'itérations. Le temps de résolution associé reste petit (environ 20% du temps total) par rapport au temps de factorisation de la matrice globale sur chaque sous-domaine. L'algorithme FETI permet donc de traiter des problèmes décomposés sans augmenter considérablement le temps de résolution. Pour information, le traitement d'un problème à $36 \times 36 \times 36$ éléments peut se faire sur 36 processeurs disposant chacun de 300 Mo. En séquentiel, ce problème requiererait plusieurs dizaines de gigaoctets.
= =

II.4.3 Representation of the RVE

The polycrystalline volume is discretised as a regular cubic mesh, and the material properties are distributed on each Gauss point. The actual aggregate in the calculation differs then slightly from the initial one. The main problem of such an approach is that the grain boundary is not a collection of oblique flat faces, but presents many steps as seen on fig. II.7. This problem will be discussed later on (Concernant l'utilisation d'éléments multiphasés, on trouve dans la littérature les travaux de Lippmann et al. et de Soh [Lippmann et al., 1997, Soh, 2000] qui mettent en avant la simplicité d'utilisation de tels éléments associée à une précision de description à l'interface entre deux matériaux très correct). Let us just note that in the present calculation we have tried to put as many integration points as possible in each grain, in order to have a reasonable general description of the stress and strain gradients in the grains. A balance must be found between two opposite requirements (*i*) having a large number of grains to have a representative microstructure, (*ii*) having enough Gauss points in each grain. A good compromise was found with 238 grains in a 18x18x18 mesh made of 20-node-elements with 3x3x3 integration (157464 Gauss points). The mean value is then

661 Gauss points in each grain. In other works dealing with polycrystals, *i.e.* for computation of aggregates containing a sufficient number of grains, the most discretised structures propose 576 points per grain in [Mika et Dawson, 1999] for a total number of 300 crystals. This large number of points is illustrated in fig. II.6, where the volume of each grain is plotted as the distance to the surface of the aggregate (each finite element is assigned a volume equal to 1, the volume of the whole structure is then $18^3 = 5832$). As many grains are cut by the "numerical machining" when the cube including 238 grains is extracted from the original aggregate, the smaller grains are near the surface. It can also be seen that more than 50 grains have more than 1000 Gauss points, and more than 100 grains have more than 500 Gauss points.

II.5 Validation of the numerical model

II.5.1 Construction of the aggregate

Two strategies are tested to generate the set of grain orientations. The first one considers 40 orientations, designed to provide a cubic symmetry [Pilvin, 1996]. Those orientations can be classified into four different "base orientations" only, which are defined in the standard triangle, each of them allowing the generation of ten grains by rotation around the last free Euler angle. All the grains generated from a given base orientation are then equivalent under tensile loading in a self consistent approach. Other orientation sets have simply been generated by a random generation of Euler angles.

Several polycrystalline aggregates have been computed that allow us to compare the responses of the F.E. model and of the self–consistent approach for different geometrical and texture realisations. In the following notation, each code *m1* to *m5* corresponds to a new geometrical aggregate. The first number specifies the number of real grains, the second one refers to the number of phases:
(*i*) microstructure (*m1-238-40*) with 238 grains whose crystallographic orientations are taken from the 40-phase set,
(*ii*) microstructure (*m1-238-238*) with 238 grains with 238 random crystallographic orientations,
(*iii*) microstructure (*m3-200-40*) with 200 grains and the same 40-phase set,
(*iv*) microstructure (*m4-200-200*) with 200 grains and 200 random crystallographic orientations (geometrical realisation 1),
(*v*) microstructure (*m5-200-200*) with 200 grains and 200 random crystallographic orientations (geometrical realisation 2).
All the computations have been made with a $18 \times 18 \times 18$ mesh. Each aggregate is described by a mesh made of $18 \times 18 \times 18$ quadratic cubic elements (20 nodes and 27 Gauss points per brick). The spatial distribution of the phases is shown in fig. II.7; (*m4*) is studied in detail in the second part of the article [Barbe et al., 2001b]. Aggregates with 10 grains or 40 grains have also been considered, but they do not produce an isotropic aggregate, since the volume fraction of each grain is not the same. Therefore the results are not reported here.

For the case of *m1-238-40*, the volume fraction of each base orientation has been controlled, it is respectively 25.09%, 25.04%, 24.97% and 24.90%. Nevertheless, the individual contribution of each ten "children" of each base orientation cannot be accurately set to 25%, since it depends on the geometry of a low number of grains. The volume fraction for each phase varies between 0.0073% and 0.0546%. For *m3-200-40*, there is no special control on any volume fraction, leading to a minimum value of 22.67%, and a maximum value of 27.15% for the base orientations.

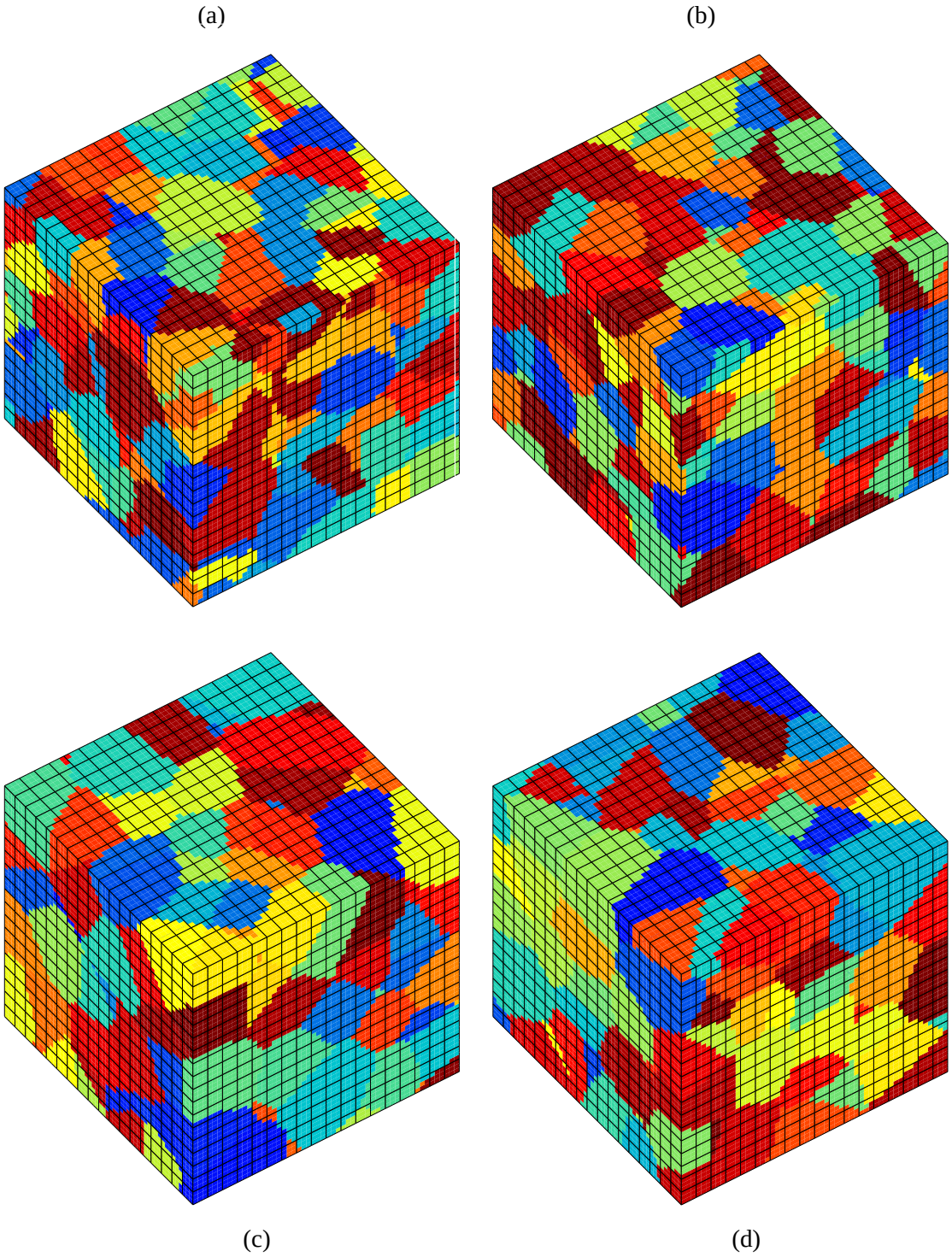


Figure II.7 : F.E. representations of all the aggregates simulated under isovolumic conditions of load : (a) m1, (b) m3, (c) m4, (d) m5

II.5.2 Influence of the geometry and of the texture

All these microstructures have been loaded in tension, in order to reach an axial strain of 1.5 %, with isovolumic conditions (lateral strain -0.75%). Reference computations have also been performed with BZ model, by taking the same crystallographic orientations and the same volume fraction for each phase. Typical results are shown in fig. II.8a,b,c where the average values of each stress and strain component on the whole mesh have been used to draw the macroscopic curve coming from the F.E.. For the sake of clarity, since the discrepancy between the various BZ responses remains low, the only curves plotted for the BZ model are the solutions obtained with *m1-238-40* microstructure (BZ-238-40), that is, with the volume fractions read in *m1-238-40*, and the reference solution with the same amount of the 40 special orientations (BZ-40-40).

In the tensile direction (fig. II.8c), the discrepancy between the various computations is very low (less than 5%), the BZ model appearing as a higher bound. The two BZ computations are the same, due to the good balance between the various base orientations. It has to be noted that the sensitivity to the different assumptions made in the computations is larger for the lateral stresses (fig. II.8a,b). The difference between the two BZ simulations in these planes is significant, the result on the real microstructure *m1-238-40* being anisotropic (116MPa in x direction, 132MPa in y direction). The larger discrepancy is found for *m1-238-40* microstructure, on *xx* component of the stress (around 8%), while the best isotropy is obtained for the *m5-200-200* microstructure.

The present results demonstrate that 200 is a reasonable number of grains, the mean behavior being almost the same for any kind of distribution. The choice of a random set of orientation seems to provide a good quality aggregate. In the following, the 40-phase distribution will be used for the comparison of the F.E. with the BZ model, since it offers the opportunity to compare the responses of individual grains which have exactly the same orientation in different positions (and with different neighbors) in the aggregate. Besides, we will switch to randomly oriented grains for further analysis of the intragranular behavior.

II.5.3 Influence of the element interpolation

Several microstructures have been computed using two different interpolation levels in the element: each aggregate is represented either with quadratic elements made of 20–node–bricks containing 27 integration points, or with linear elements made of 8–node–bricks containing 8 integration points. The structures have been generated in such a way that the number of integration points in a given microstructure remains the same whether the elements are quadratic or linear. In this type of computations, the linear meshes usually appear to be too stiff. This is illustrated in fig. II.9, which shows the macroscopic stress–strain curve for the case of *m1-238-40* microstructure. The difference is still more important on a transgranular level, the quadratic interpolation allowing a finer description of the local fields. As demonstrated by fig. II.10a,b, which shows the contour plot of the amount of plastic slip (defined as the sum of the slips over the systems: $\sum_s |\gamma^s|$), after a 1.5% tension, there is a qualitative agreement between the two calculations concerning the zone of strain concentration, nevertheless the values are quite different: the range is (0.00545—0.0858) for the linear mesh, while (0.00005—0.1219) is obtained with the quadratic interpolation.

= =

En complément de la comparaison pour deux types d'éléments cubiques à intégrations différentes, une autre comparaison a été faite, en coopération avec T. Kanit [Kanit, 2000], entre des éléments

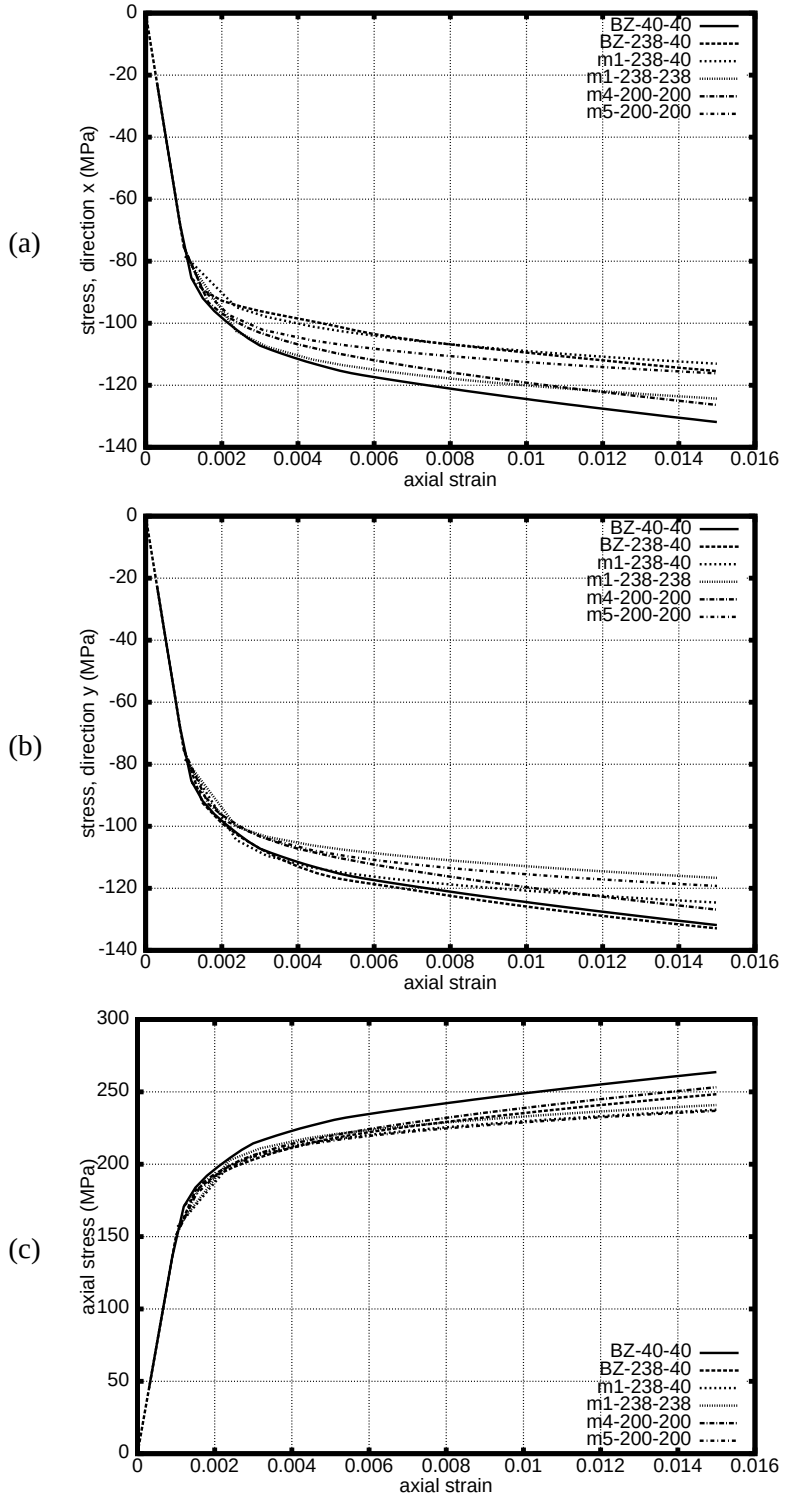


Figure II.8 : Comparison of the mean stress–strain response of four aggregates subjected to iso-volumic loading conditions : (a) stress in direction x, (b) stress in direction y, (c) axial stress

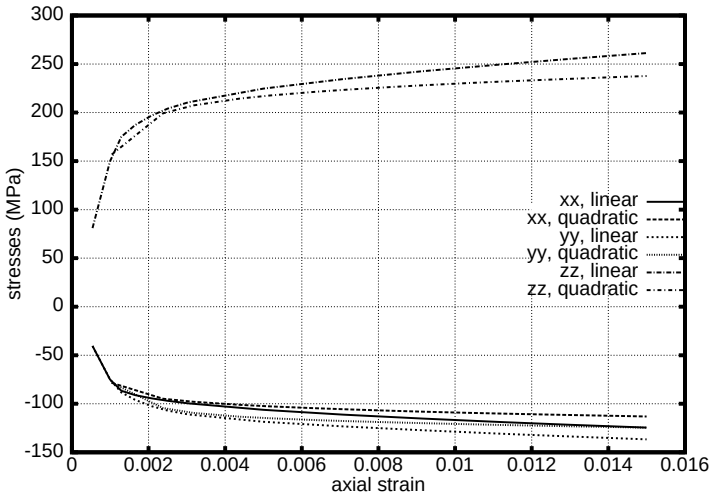


Figure II.9 : Effect of the interpolation mode on the mean stress–strain response of the aggregate *m1-238-40* subjected to isovolumic loading conditions

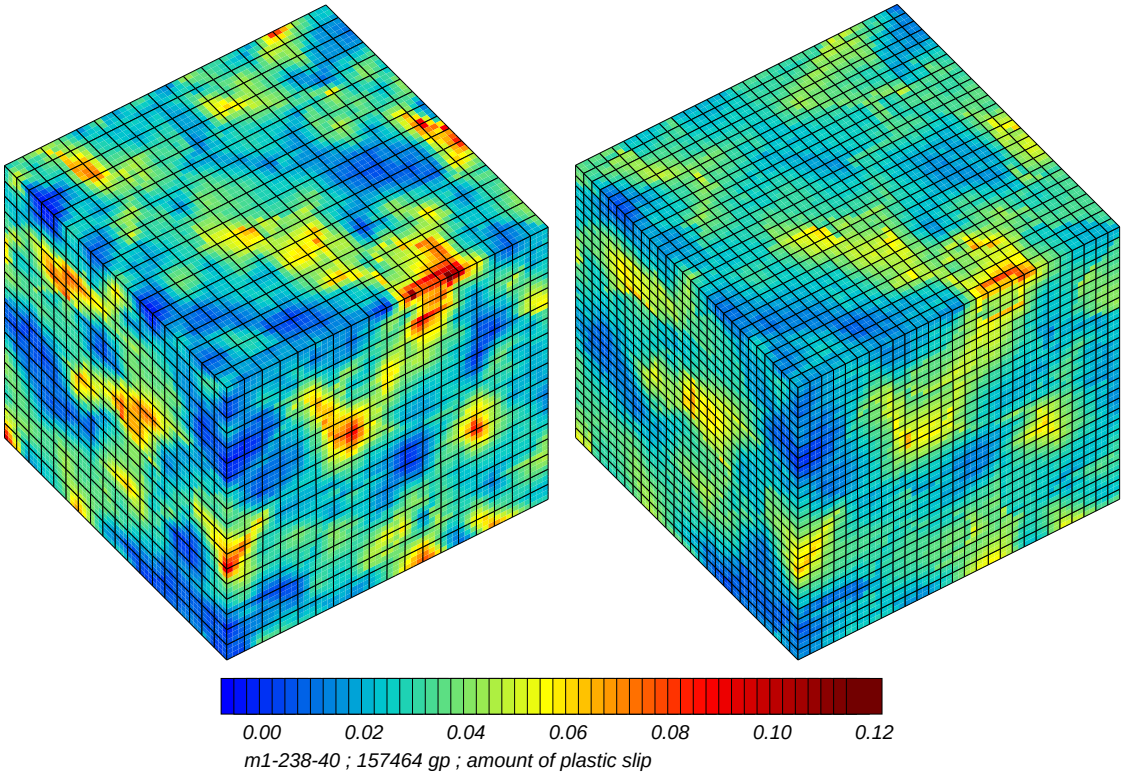


Figure II.10 : Effect of the interpolation mode on the local slip activity of the *m1-238-40* distribution subjected to isovolumic loading conditions: (left) 5832 quadratic elements, 157464 integration points, (right) 19683 linear elements, 157464 integration points

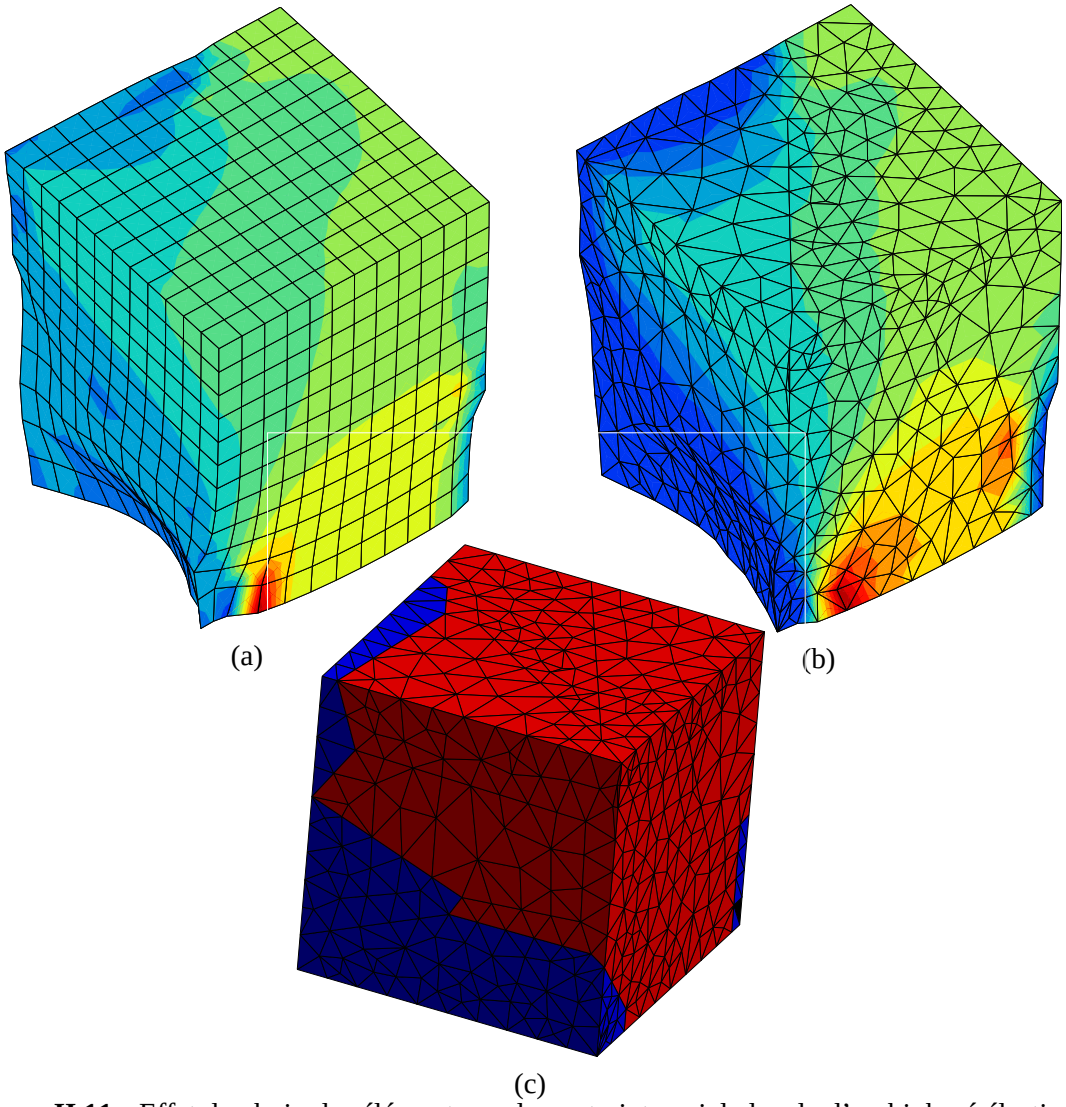


Figure II.11 : Effet du choix des éléments sur la contrainte axiale locale d'un biphasé élastique ; le contraste des modules vaut 100, le milieu est constitué de 20 grains sous forme de polyèdres de Voronoï répartis en 2 phases, 70% de dur, 30% de mou ; (a) cubes à 8 nœuds, (b) tétraèdres, (c) microstructure ([Kanit, 2000])

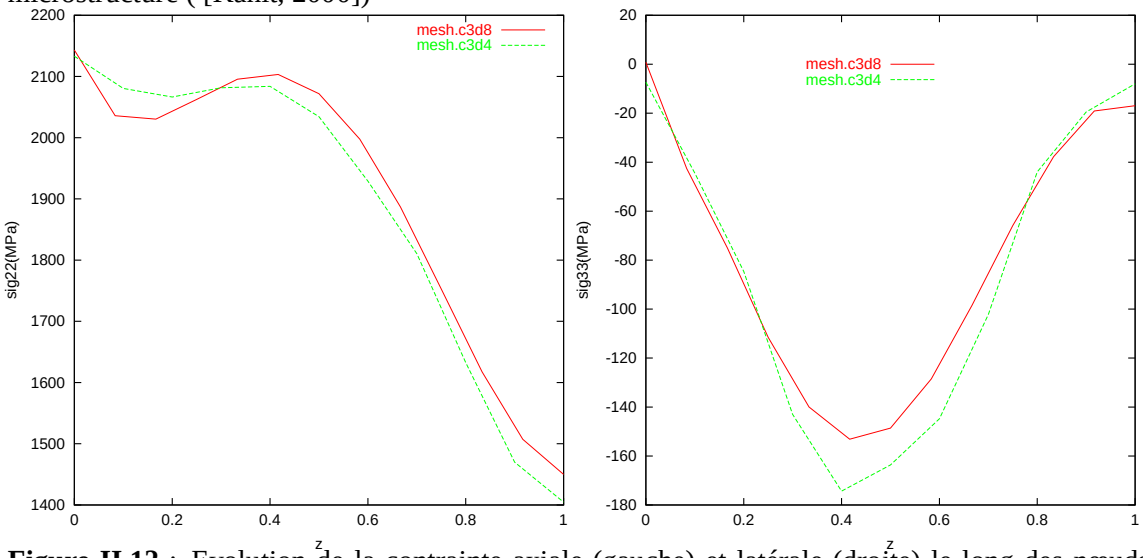
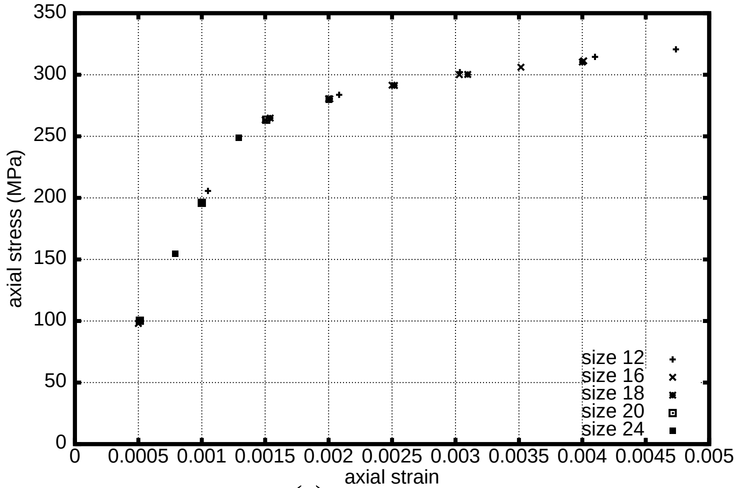


Figure II.12 : Evolution de la contrainte axiale (gauche) et latérale (droite) le long des nœuds d'une arête perpendiculaire à l'axe de traction sur les cubes des figures II.11a,b ([Kanit, 2000])



(a)

elt number	min	max
12^3	194.80	411.02
16^3	191.42	464.42
18^3	185.68	456.90
20^3	184.19	470.94
24^3	180.37	470.91

(b)

Figure II.13 : Effect of the mesh size on the response of the *m4-200-200* microstructure after a 0.2% tension: (a) axial stress *vs* axial strain, (b) min and max local values of the axial stress

cubiques à intégration réduite et des éléments tétraédriques (voir figure II.11) pour un biphasé de contraste 100 en élasticité isotrope (le contraste est défini comme le rapport des modules d'Young). Elle révèle une distribution locale des déformations similaire dans les deux cas et une réponse macroscopique inaltérée. Les courbes des figures II.12a,b montrent que l'accord qualitatif entre les deux types de maillages est bon. Quantitativement il y a une différence de l'ordre de 15%, ce qui est lié au fait que l'on ne fait pas figurer plus de quelques éléments par grain. On résumera plus loin notre position sur le nombre d'éléments à introduire dans le modèle, en fonction de la quantité physique que l'on cherche à évaluer. Une telle comparaison a aussi été menée par Eberl dans le cadre du calcul d'éprouvette multicristalline avec ZéBuLoN, qui a conduit à une différence de comportement local acceptable entre deux types de maillage (tétraédrique, prismatique) [Eberl, 1999]. Ces résultats sont satisfaisants car il n'était pas acquis d'avance de retrouver de bons résultats qualitatifs : Watanabe et ses co-auteurs ont effectué des comparaisons de simulations 2D avec des maillages à 3 nœuds (triangles) et à 4 nœuds (quadrilatères) et constatent une différence flagrante de distribution des bandes de cisaillement dans une éprouvette à 50 grains, malgré le grand nombre d'éléments par grain [Watanabe et al., 1998]. Ceci est probablement lié à la mauvaise qualité des éléments triangulaires à 3 nœuds d'une part, et au fait qu'une modélisation 2D est plus sensible au maillage qu'une modélisation 3D.
= =

II.5.4 Influence of the size of the mesh

In order to check the convergence of the mean stress–strain response relatively to the number of elements used to represent a given aggregate, the simulation of a simple tensile test on microstructure (*m4-200-200*) has been performed with four meshes of different sizes:
– $16 \times 16 \times 16$ quadratic elements, *i.e.* 110592 integration points,
– $18 \times 18 \times 18$ quadratic elements, *i.e.* 157464 integration points,
– $20 \times 20 \times 20$ quadratic elements, *i.e.* 216000 integration points,
– $24 \times 24 \times 24$ quadratic elements, *i.e.* 373248 integration points.

Only the onset of plasticity was computed in the bigger meshes (20^3 and 24^3 elements), so that

the comparison is made for a low total strain (0.2%). It is not surprising to check that the global response is the same for all the meshes, as shown in fig. II.13, since it is known that a relatively low number of elements (typically 12^3) provides the proper answer. On the other hand, the local response still depends on the size of the mesh in the investigated range, as summarised in fig. II.13b, which contains the min and max values of the axial stress in the aggregate. This effect can be precised by the observation of the contour plots of the axial stress in fig. II.14 and of the cumulated slip on all the slip systems, in fig. II.15. These last contours are specially significant, since they show the organisation of the deformation patterns independently of the local microstructure (*i.e.* localisation zones crossing the grain boundaries). These patterns become finer when the precision of the mesh increases.
= =

II.5.5 Comparaison de la réponse EF avec la réponse homogénéisée d'un milieu biphasé élastique

Les calculs présentés ici ont été menés par T. Kanit [Kanit, 2000] dans un cadre de collaboration interne au laboratoire. Ils portent sur la simulation d'un milieu biphasé élastique à partir du même type de microstructures que dans cette étude (polyèdres de Voronoï), avec le même code éléments finis (ZéBuLoN). Pour un contraste de 3 entre les modules élastiques (rapport des modules d'Young), celui-ci a tracé les réponses effectives de VER en fonction de la fraction volumiques de phase dure, d'après des calculs EF et par homogénéisation (Figure II.16). L'homogénéisation est obtenue par la réponse analytique d'une inclusion sphérique en interaction avec un milieu homogène. Les réponses sont bien comprises entre les bornes de Voigt et de Reuss, et l'accord entre les calculs EF et l'homogénéisation est tout à fait satisfaisant.

II.5.6 Influence du nombre d'éléments sur la réponse effective d'un milieu biphasé élastique

Les résultats de la section précédente doivent être examinés à la lumière de ceux qui sont reportés en figure II.17 [Kanit, 2000]. Ces résultats montrent la convergence de la réponse effective d'un agrégat en fonction du nombre de degrés de liberté pour trois fractions volumiques différentes d'un milieu biphasé, avec un contraste de propriétés égal à 100. Ce milieu est constitué de 1000 polyèdres de Voronoï. L'écart maximum relatif entre 2 réalisations de microstructures dans de telles conditions (1000 grains, fraction $70-30$, contraste 100) est de l'ordre de 10% [Kanit, 2000]. Cet écart est dû au fait que les comportements sont très contrastés donc très dépendants de la morphologie de la phase dure. Il n'est donc pas étonnant de retrouver sur la figure II.17 une différence de comportement de l'ordre de 16% entre une réalisation de microstructure à 72% et une réalisation à 70% de phase dure. Le plus important reste de constater que la réponse ne varie presque plus à partir d'un certain nombre de degrés de liberté (environ 1% de variation pour 300000 ddl) et que la différence entre un calcul EF et un calcul d'homogénéisation ne dépasse pas 5% pour les trois fractions volumiques.

II.5.7 Influence du nombre d'éléments et de grains sur la réponse effective en élasticité hétérogène

Nous avons cherché à savoir s'il était possible, en élasticité, de définir un nombre minimum d'éléments à partir duquel la réponse effective d'un agrégat ne varie plus, pour 200 grains et pour 1000. Cette étude a été effectuée en premier lieu avec du zinc à élasticité isotrope transverse.

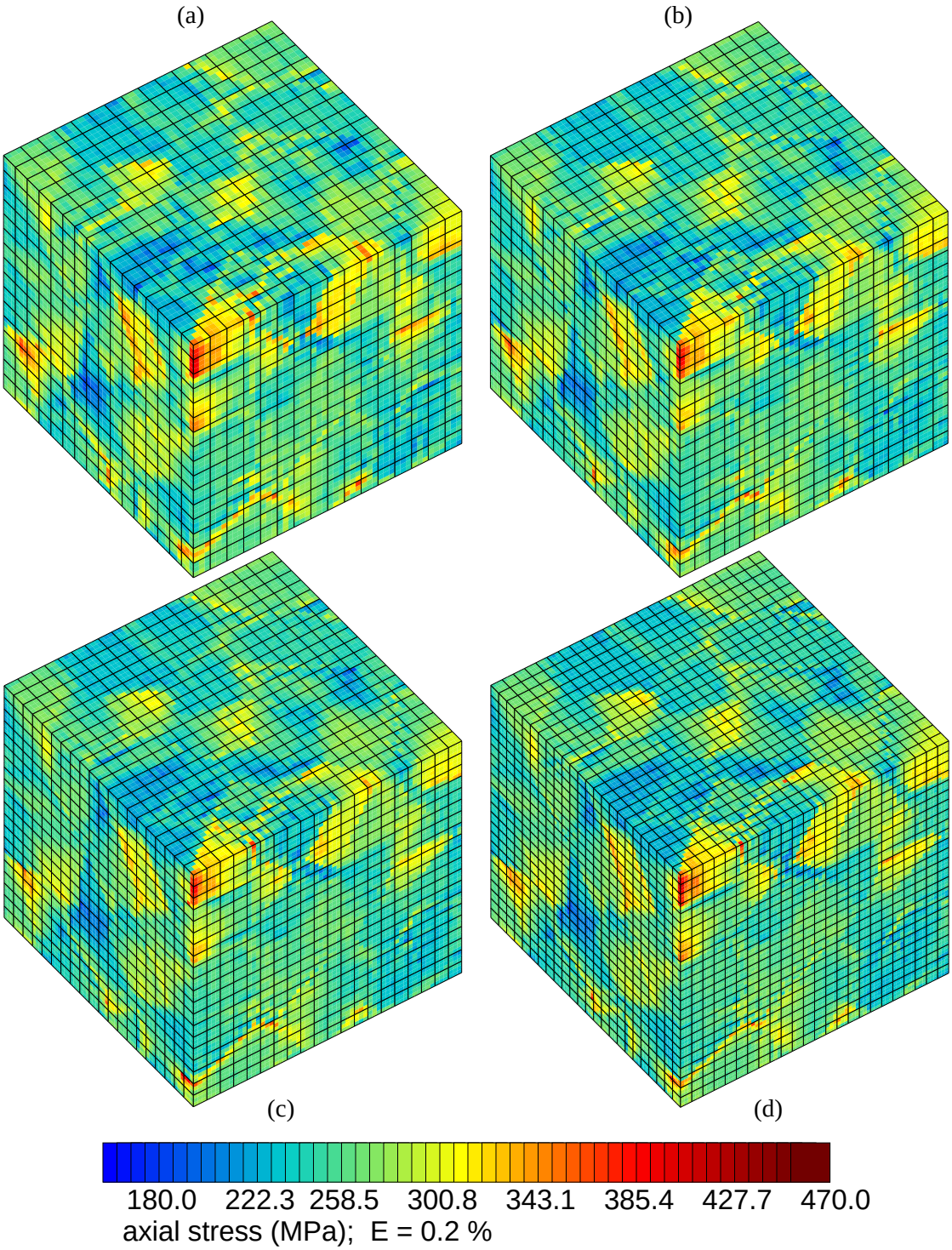


Figure II.14 : Effect of the mesh size on the local behavior of the *m4-200-200* microstructure after 0.2% simple tension: (a) 16^3 quadratic elements, (b) 18^3 quadratic elements, (c) 20^3 quadratic elements, (d) 24^3 quadratic elements

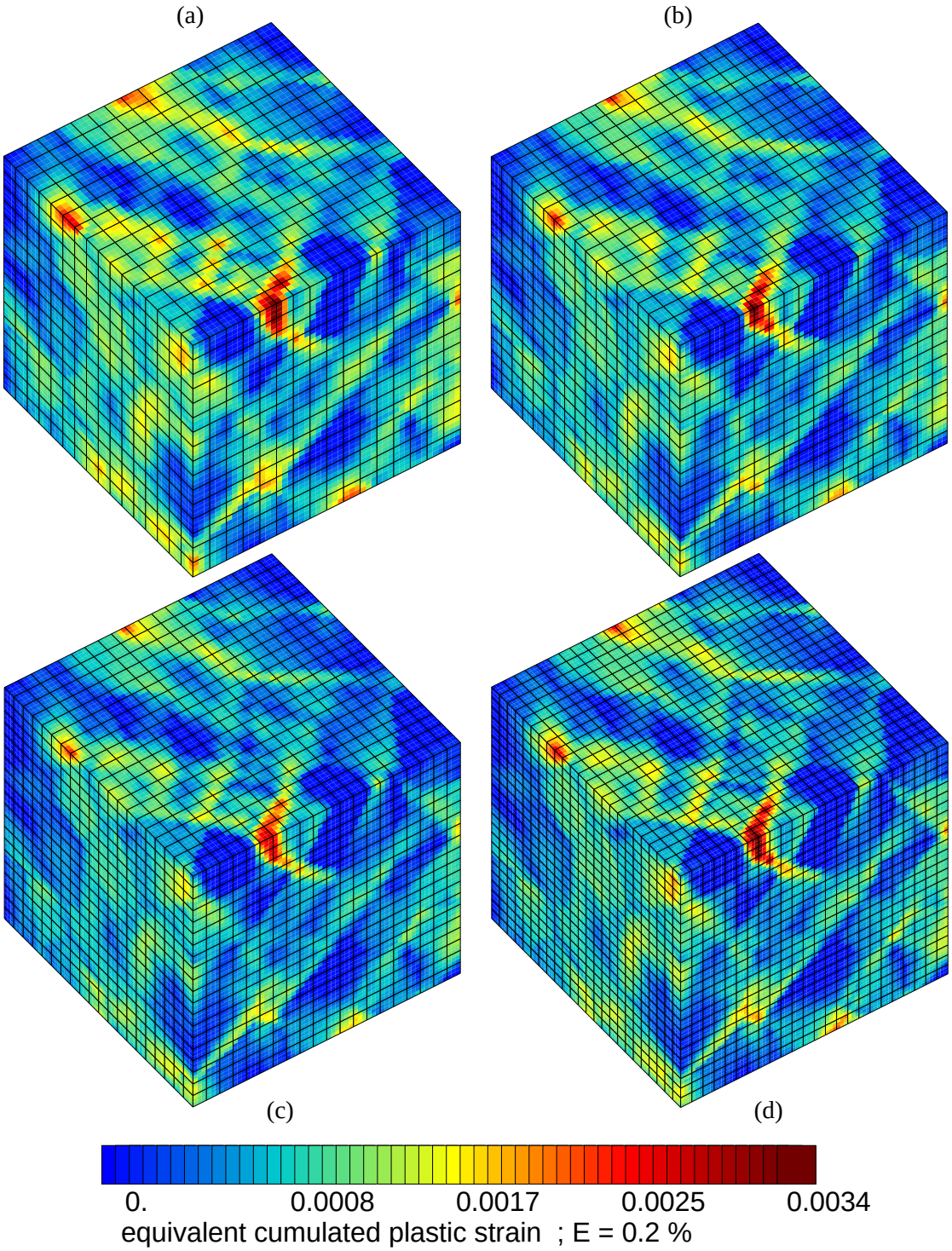


Figure II.15 : Effect of the mesh size on the local behavior of the *m4-200-200* microstructure after 0.2% simple tension: (a) 16^3 quadratic elements, (b) 18^3 quadratic elements, (c) 20^3 quadratic elements, (d) 24^3 quadratic elements

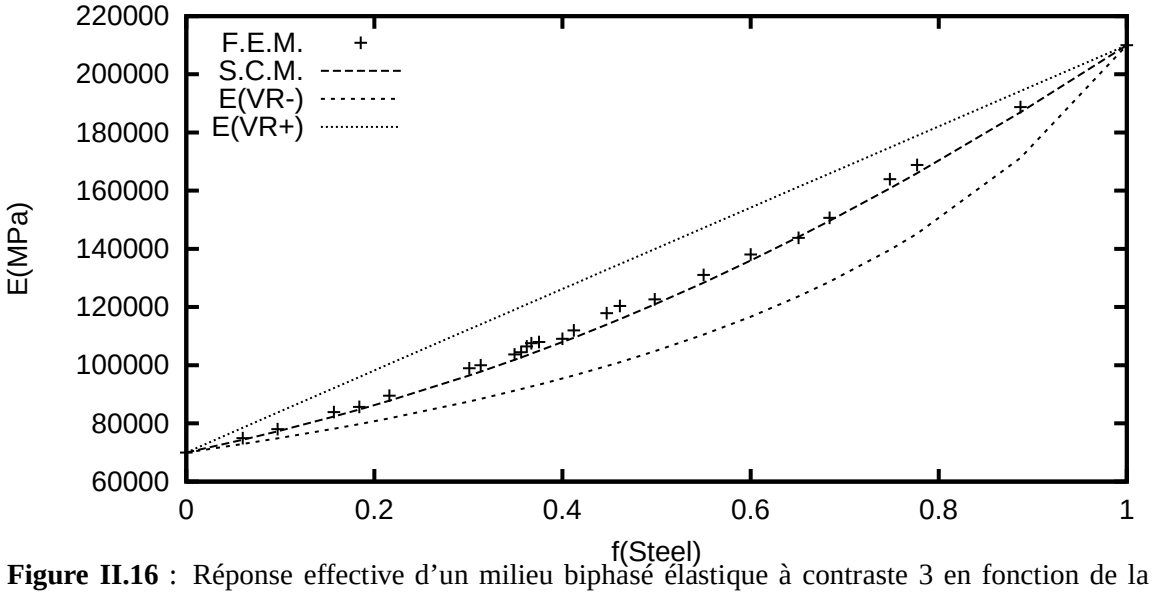


Figure II.16 : Réponse effective d'un milieu biphasé élastique à contraste 3 en fonction de la fraction volumique, par EF et par homogénéisation ([Kanit, 2000])

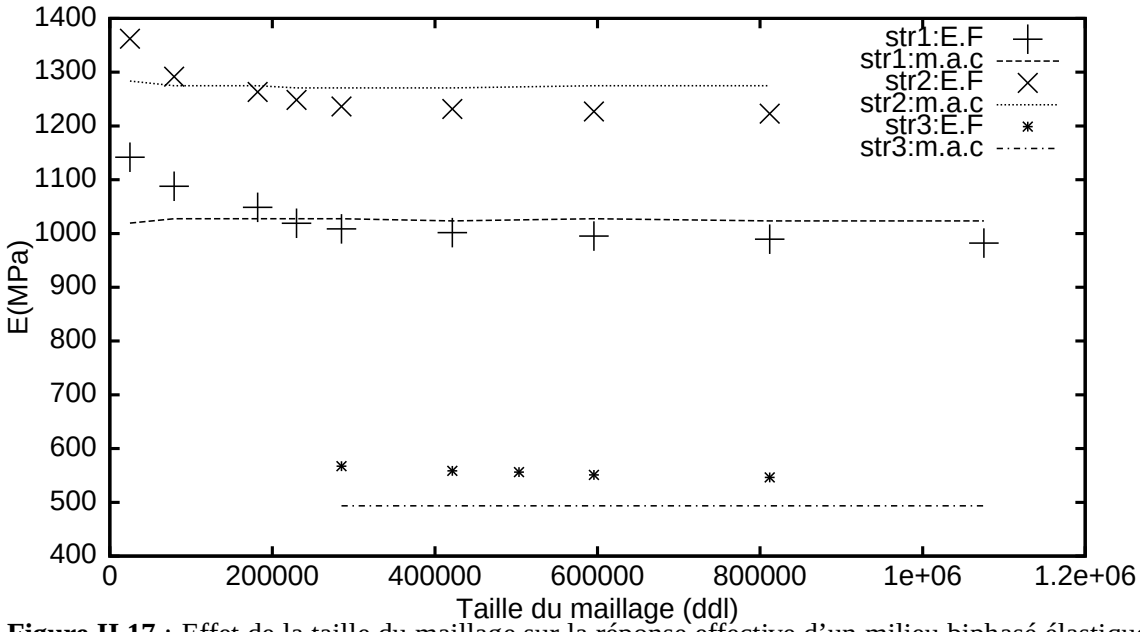
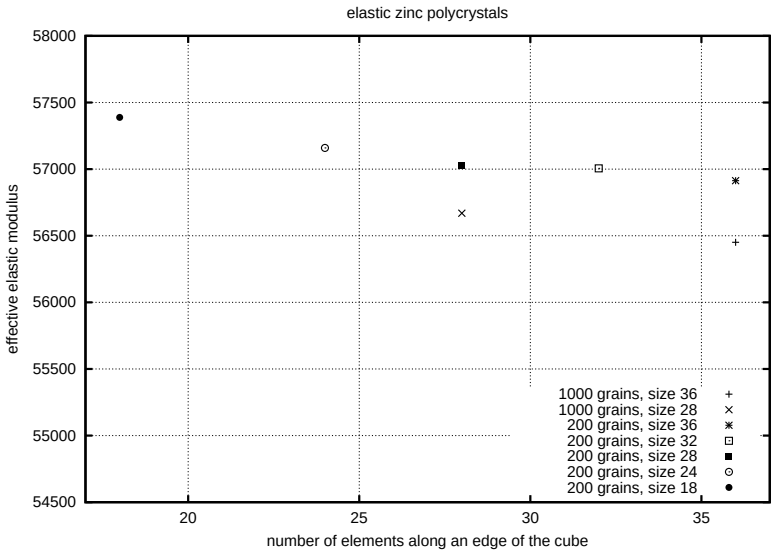


Figure II.17 : Effet de la taille du maillage sur la réponse effective d'un milieu biphasé élastique à contraste 100 pour 3 fractions volumiques : 72, 70 et 55% de phase dure ([Kanit, 2000])

(a)



(b)

caractéris. polycristal	1000 gr	447 gr géom1 orient1	447 gr géom1 orient2	447 gr géom2 orient1	447 gr géom2 orient2
σ_{zz}	530.2	528.9	537.3	528.0	529.3

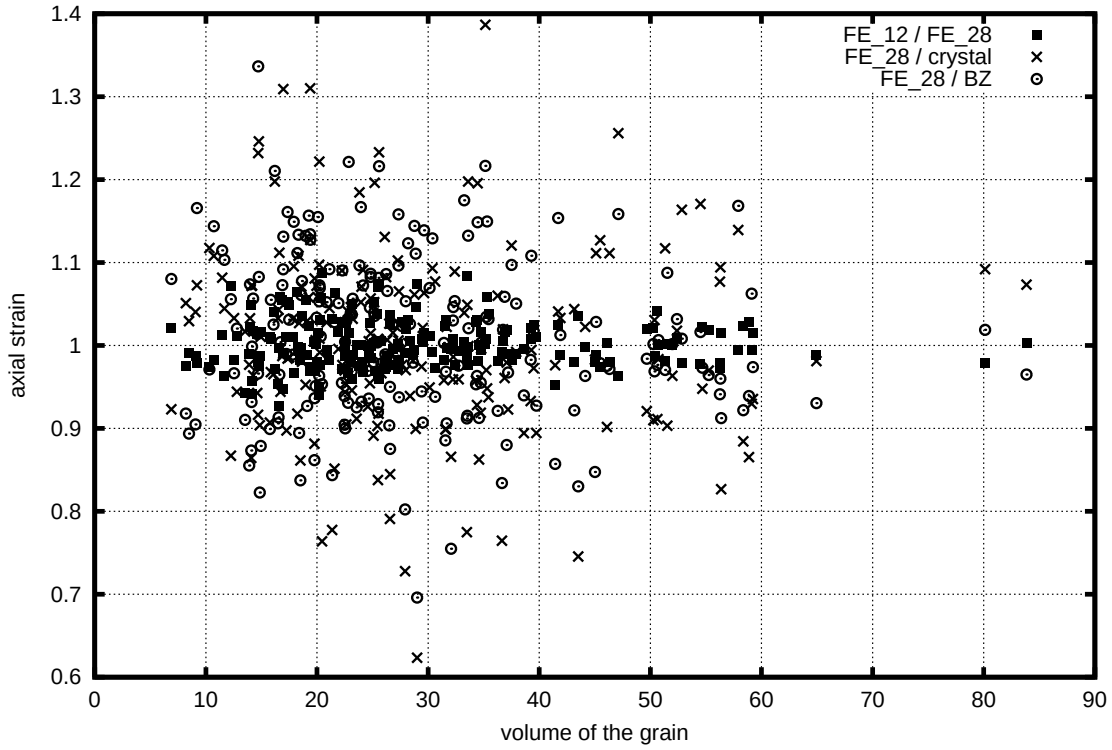
Figure II.18 : Réponses effectives d'agrégats de zinc en élasticité : (a) modules élastiques pour 200 et 1000 grains, pour un nombre variable d'éléments ; (b) contrainte axiale pour deux réalisations d'agrégats à 447 grains et deux jeux d'orientations aléatoires

Les résultats sont présentés sur la figure II.18a. On remarque tout d'abord un effet de la rigidité du maillage : le module effectif décroit régulièrement alors que le nombre d'éléments augmente. De même, plus le nombre de grains est élevé, plus la sensibilité à la rigidité du maillage est importante. Toutefois cet effet peut être considéré comme négligeable dans les configurations abordées. Pour l'agrégat à 200 grains, il y a moins de 1% d'écart entre le module du maillage à $18 \times 18 \times 18$ éléments et celui du maillage à $36 \times 36 \times 36$. Si l'on définit le degré de discrétisation en nombre d'éléments par grain, que ce soit pour 200 ou 1000 grains, on constate qu'avec $3 \times 3 \times 3$ éléments par grain, la réponse effective varie de moins de 1% par rapport à la réponse du plus gros maillage. La figure II.18b présente les réponses effectives pour 2 agrégats de microstructures différentes contenant le même nombre de grains (447) et le même nombre d'éléments (28^3). Comparativement à la réponse à convergence d'un agrégat à 1000 grains, 447 grains permettent d'obtenir une réponse élastique effective à 1.6% près. On remarque que pour ce cas précis, ce n'est pas la donnée de la géométrie qui affecte le plus la réponse mais la donnée des orientations. Notons enfin que, au delà de 200 grains et avec un peu plus de 20 éléments par grains, l'erreur dûe à la discrétisation n'excède pas l'erreur dûe au nombre de grains : l'écart maximum entre toutes les réponses effectives est lui aussi de l'ordre de 1.5%.

II.5.8 Influence du nombre d'éléments sur la réponse moyenne par grain

Le nombre d'éléments de la structure conditionne beaucoup plus le comportement moyen des grains que la réponse macroscopique comme le montrent les figures II.19a,b. Effectivement le rapport de la déformation axiale ou de la contrainte moyenne par grain du calcul à $12 \times 12 \times 12$ éléments sur la réponse par grain du calcul à $28 \times 28 \times 28$ éléments évolue entre 0.9 et 1.1 alors que la réponse macroscopique est la même à moins de 1% près (voir figure II.13). On remarque aussi que plus le grain est gros, plus sa réponse moyenne s'approche de sa valeur à convergence (le vol-

(a)



(b)

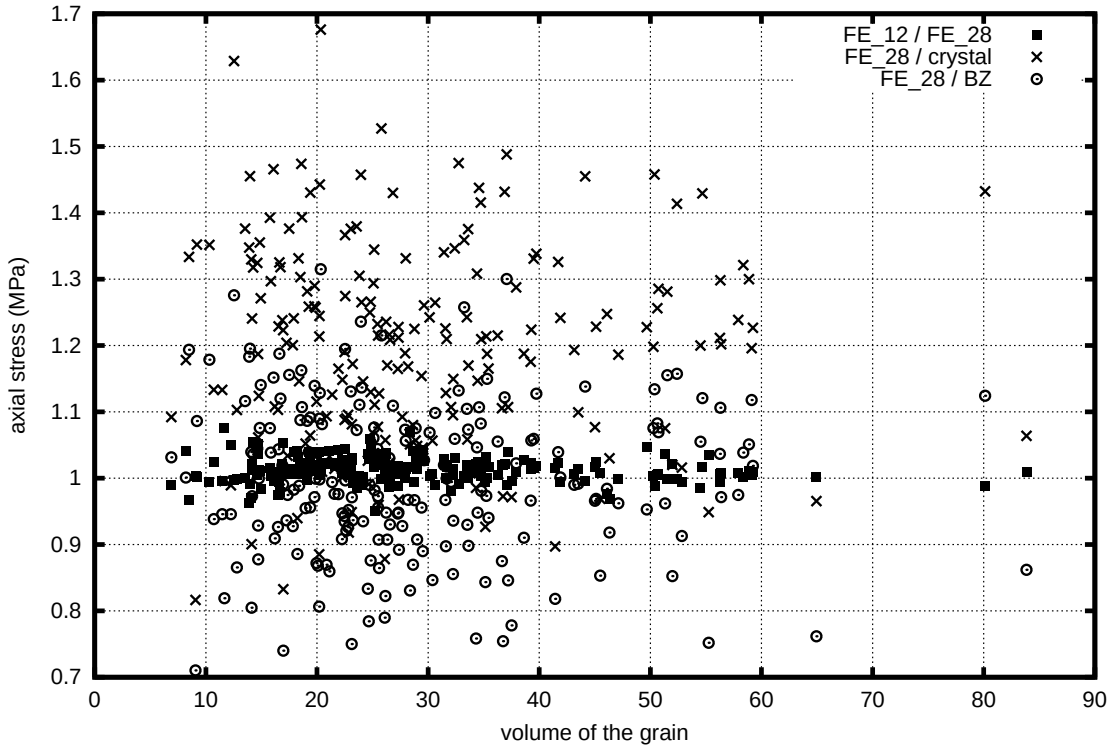


Figure II.19 : La réponse effective de chaque grain de l'agrégat *m4* est calculée avec *(i)* une structure EF de référence ($28 \times 28 \times 28$ éléments), *(ii)* une structure EF plus petite ($12 \times 12 \times 12$ éléments), *(iii)* le modèle d'homogénéisation avec la loi BZ. La réponse du monocristal correspondant à chaque grain est aussi calculée, avec les conditions de chargement de l'agrégat ; chaque réponse est normée avec le résultat de référence (EF 28^3) et présentée en fonction du volume du grain ; (a) déformation axiale (b) contrainte axiale

ume des grains est déterminé à partir de la structure à $28 \times 28 \times 28$ éléments, chaque élément ayant un volume égal à 1). Il paraît donc clair qu'en ne mettant pas assez de points d'intégration dans un grain, on affecte considérablement son comportement (en doublant le nombre d'éléments nous avons divisé l'erreur par au moins 2). Les résultats concernant l'homogénéisation révèlent une erreur beaucoup plus prononcée, jusqu'à 30%, ce qui signifie bien l'importance de l'interaction entre grains dans le comportement effectif de chacun. Il est donc inutile pour ce type de sollicitations (déformation axiale à 1.5%) et ce type de polycristal (200 grains, INCO600) de songer à prévoir le comportement moyen de chaque grain avec un modèle d'homogénéisation. Quant à une éventuelle corrélation entre le comportement moyen d'un grain et son orientation cristallographique, elle n'apparaît pas du tout dans ces conditions. On peut penser qu'il n'y a pas assez de grains dans l'agrégat pour que chacun puisse se comporter en fonction de son orientation. Il n'en est rien comme on le constate sur les figures **??**a,b. L'effet observé n'est pas non plus imputable au volume des grains : un récent calcul avec $32 \times 32 \times 32$ éléments a montré que la réponse moyenne d'un grain de volume supérieur à 40 *i.e.* contenant 40 éléments, soit environ $10 \times 10 \times 10$ points d'intégration, varie de moins de 1% quand on augmente son volume.

II.5.9 Influence du nombre d'éléments sur la réponse locale

Pour connaître l'influence du nombre d'éléments du maillage sur la réponse locale, nous proposons une comparaison portant encore une fois sur des simulations de traction simple à 1.5% sur un polycristal d'INCO600 à 200 grains (*m4*) effectuées sur des structures contenant respectivement 18^3, 28^3, 32^3 éléments quadratiques (figure II.20a,b,c). Chaque grain de la plus grosse structure est donc représenté en moyenne par plus de 4000 points d'intégration, soit 16 dans chaque direction de l'espace. Chaque figure reporte la distribution de la somme des glissements ($\sum_s |\gamma^s|$) sur les systèmes dans une tranche interne de la structure. La différence de répartition des zones de localisation des glissements est due non seulement à la différence du nombre de points mais aussi au fait que les points que nous observons sur la figure II.20a ne sont pas tout à fait à la même hauteur que ceux de figure II.20b et II.20c : chaque tranche correspond aux points d'intégration immédiatement en dessous du milieu de la structure, le milieu étant exactement une frontière d'éléments. Ainsi, exprimées dans le repère de la structure à 32^3 éléments, les positions des figures II.20a,b,c le long de l'axe z sont respectivement $z = 15.799, 15.871, 15.887$.

Malgré l'incertitude liée à la position, nous pouvons retenir de cette comparaison que les structures de déformation sont beaucoup mieux représentées quand on utilise beaucoup de points, ce qui permet de distinguer et de mieux délimiter les zones de localisation. Il apparait notamment clairement sur les figures des structures à 28^3 et 32^3 éléments que les zones de localisation des glissements se développent à l'intérieur des grains et ne traversent pas les joints de grains sans marquer une variation. On constate donc qu'il y a une forte influence locale de l'interaction entre grains puisque la localisation s'opère surtout au voisinage des joints de grain ; mais les zones qui en résulte restent intimement liées à la microstructure, elles ne se développent pas sans discernement des grains. Une autre information intéressante, déjà exprimée dans la section II.5.4, concerne la validité de la réponse locale obtenue avec la structure à 18^3 éléments. Cette structure permet de reproduire grossièrement toutes les zones de localisation prédites par les plus grosses structures. Ainsi, les informations locales que nous avons déduites des structures à 18^3 éléments pour des analyses locales (chapitre III) sont significatives d'un comportement qui a localement convergé.

Nous avons présenté ces contours en complément de ceux des figures II.14a,b,c,d car ils sont tirés de calculs à plus grande déformation (1.5% au lieu de 0.2%) et ils représentent une distribution à l'intérieur de la microstructure, là où le comportement local est le moins affecté par les conditions imposées sur le contour (voir l'effet de ces conditions en section III.4). On vérifie par

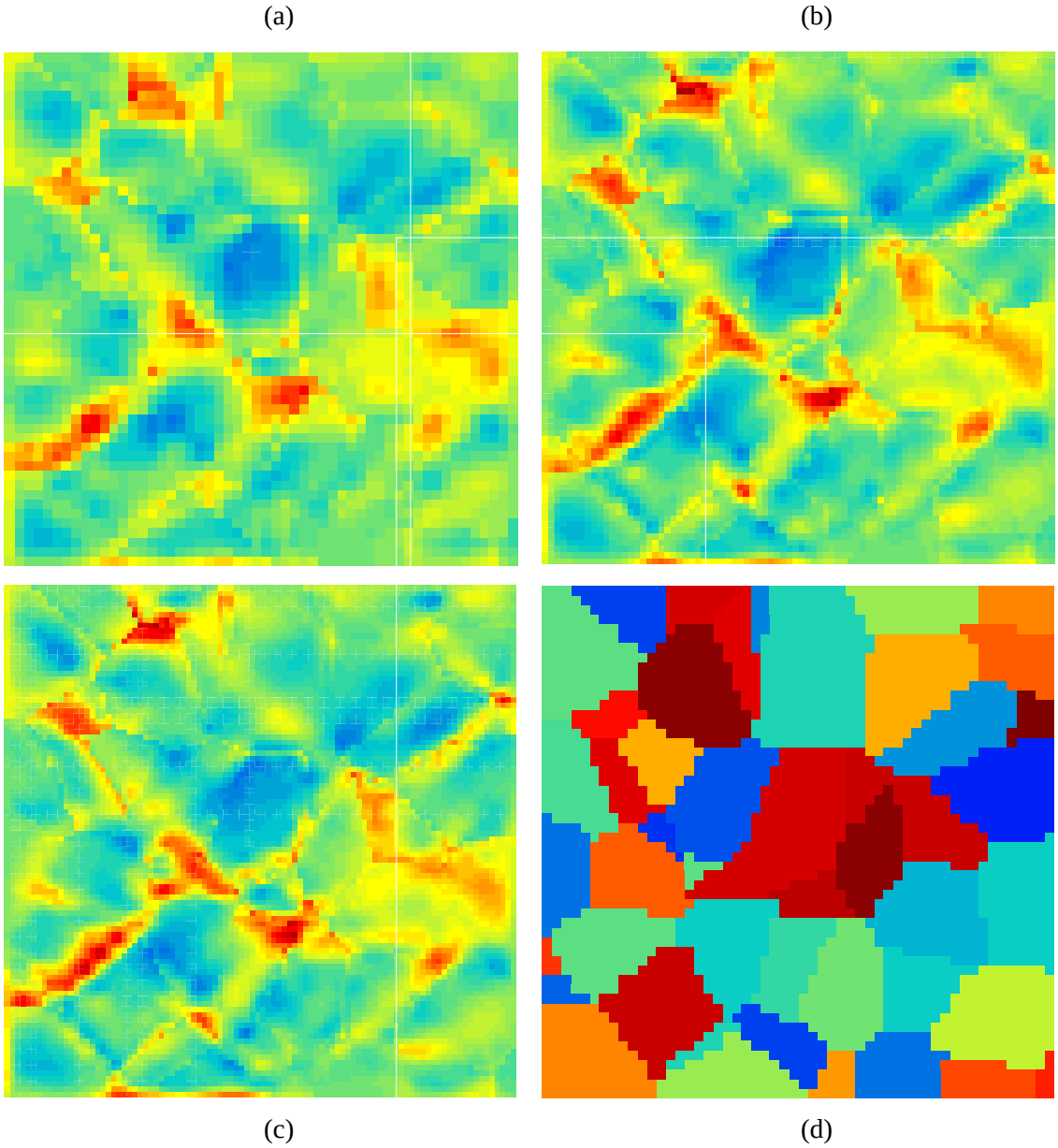


Figure II.20 : Comparaison de la distribution de la somme des glissements ($\sum_s |\gamma^s|$) sur une tranche de l'agrégat *m4* décrit avec (a) $18 \times 18 \times 18$ éléments, (b) $28 \times 28 \times 28$ éléments, (c) $32 \times 32 \times 32$ éléments, (d) Carte des grains sur la structure à $18 \times 18 \times 18$ éléments

la même occasion que les méso-structures de localisation des glissements sont présentes tant sur le contour qu'au cœur de la structure avec une tendance à s'orienter le long des joints de grain.

L'influence du nombre d'éléments peut donc être résumée de la façon suivante :

- la taille des structures modélisées peut être caractérisée par la taille du maillage (en terme de nombre de degrés de liberté ou de nombre de points d'intégration, du point de vue du numéricien) ou par le nombre de grains du polycristal (point de vue du mécanicien);
- pour obtenir une représentation raisonnable de la microstructure, il faut tout de même tenir compte d'une corrélation entre le nombre de points d'intégration et le nombre de grains. Cette corrélation est liée à l'échelle de représentativité souhaitée pour la prédiction du comportement :
  - si on recherche une prédiction de comportement macroscopique global, une discrétisation à 200 points d'intégration par grain conviendra amplement -ceci correspond à une discrétisation moyenne de $2\times2\times2$ éléments quadratiques par grain ;
  - si on espère connaître correctement le comportement moyen de chaque grain de l'agrégat alors il faudra y faire figurer de l'ordre de 800 points d'intégration par grain -soit en moyenne $3\times3\times3$ éléments quadratiques par grain ;
  - dans le cadre d'une modélisation du comportement intragranulaire, à supposer que l'on se contente de 12 points sur une droite pour représenter 2 gradients (2 gradients, c'est-à-dire 2 variations de pente, soit la possibilité de représenter 2 portions distinctes du comportement avec une accommodation entre ces 2 portions ; c'est le strict minimum requis pour prétendre modéliser un comportement intragranulaire), il faut faire figurer de l'ordre de $(12+2)^3$ soit 2700 points par grain, les 2 points supplémentaires dans chaque direction de l'espace étant dédiés à l'accommodation au niveau des joints de grain. Ce cas nécessite donc en moyenne de l'ordre de $5\times5\times5$ éléments quadratiques par grain.

= =

II.5.10 Local comparison with the self–consistent model

The previous comparisons between F.E. and BZ model only concern the global response. The curve in fig. II.21 shows the comparison of the tension curves obtained for each "base orientation" of the *m1-238-40* microstructure. The curve is obtained from the F.E. result by averaging the value of the axial stress and strain components in four classes of grains coming from the same initial orientation, as explained in section (II.5.1). The agreement is correct, but not as good as for the global loading. This difference is a first step toward the high level of heterogenity which will be discussed in the second part of the article.

II.6 Conclusion

The present paper describes a numerical environment for studying the mechanics of crystalline solids on a microscale. The main results concern the validation of the different tools and of the numerical techniques. Synthetic microstructures can be created to represent material elements

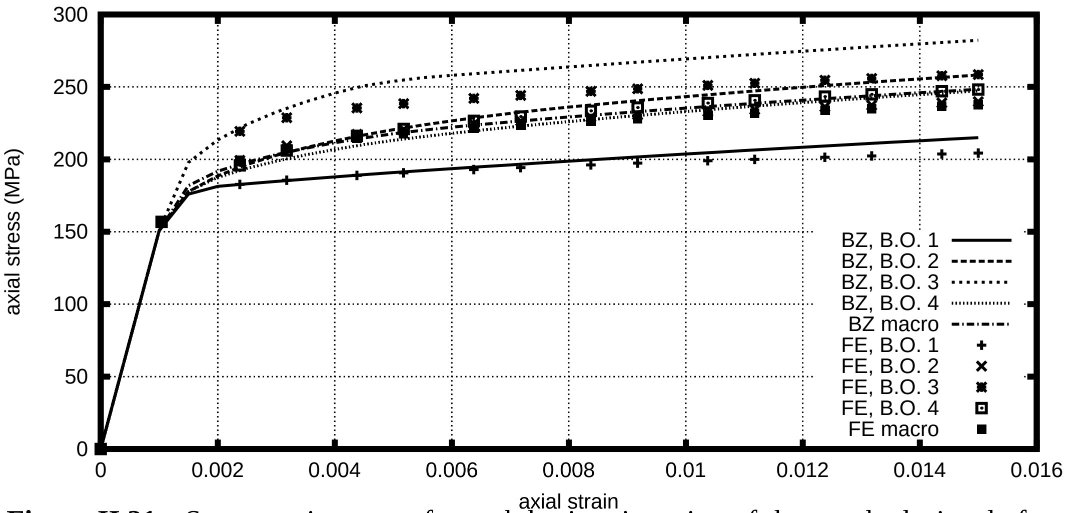


Figure II.21 : Stress-strain curves for each basic orientation of the standard triangle for the *m1-238-40* microstructure tensile strained at 1.5% with isovolumic conditions

with a controlled number of grains. Prescribed textures can therefore be applied to the aggregate. The first purpose of this paper was to propose a solution to get a representative microstructure for an isotropic RVE. It is not surprising to see that it is better to work with as many grains as possible. On the other hand, it is shown that the results obtained are quite comparable with a random microstructure or a polycrystal with a reduced number of orientations, chosen to reproduce an isotropic behavior. In the following part [Barbe et al., 2001b], we will work with at least 200 grains, and a random microstructure. The influence of the mesh size has also been considered. It can be observed that, since small strain assumption is used in the paper, quadratic elements give better results than linear ones. Full integration in the quadratic elements ($3 \times 3 \times 3$ integration points per element) gives the opportunity to have a better description of the local geometry and remains acceptable compared to reduced elements. With our conditions of loads, the overall strain is not too high so that the elastic strain cannot be neglected and the definition of hydrostatic stresses is still correct. Using a $18 \times 18 \times 18$ mesh corresponds to a good quality–price ratio, as confirmed by computations performed with $20 \times 20 \times 20$ and $24 \times 24 \times 24$ elements. In the last section of the paper, the F.E. model is also validated with respect to the self–consistent approach. The agreement between the macroscopic responses is good, with only 2% discrepancy in terms of stress for a given strain. The heterogenity on the phases is also correctly represented, even if the difference for the two types of modeling reaches now 8% for the local axial stresses. In the following part, the numerical procedure will be used to compute an aggregate made of $18 \times 18 \times 18$ elements in order to provide a numerical evaluation of the various stress and strain fields on a microscale, specially concerning the intragranular heterogenity, which is essential to understand damage initiation.

= =

II.7 Résumé des possibilités offertes par la méthode et les modèles

Les lois de comportement utilisées dans notre modélisation concernent les petites déformations pour lesquelles les mécanismes sont uniquement liés aux glissements cristallographiques ; le maclage n'est pas pris en compte dans ces calculs. L'augmentation de la contrainte associée aux déformations plastiques correspond à un écrouissage isotrope et cinématique sur chaque système

de glissement. L'écrouissage isotrope sur un système est induit par son glissement mais aussi par les glissements des autres systèmes (écrouissage latent). Il est possible de calculer les rotations de réseau cristallin sous la forme de variables internes. Si ces rotations sont trop grandes, alors il faut faire intervenir des degrés de liberté supplémentaires pour décrire la cinématique de ces rotations et le couple de contrainte associé. C'est ce qui est fait dans le modèle de milieu micropolaire (Cosserat) développé par S. Forest, présenté en annexe.

Concernant la modélisation de la structure, il n'y a a priori de limitation pour le nombre de grains étudiés que par les capacités numériques dont nous disposons. Autant le générateur de microstructure (VPoly3D) que le code de calcul par éléments finis (ZéBuLoN) sont conçus pour modéliser des structures dont nous n'avons pas encore atteint les limites. Une particularité de cette modélisation est de permettre la représentation de microstructures très réalistes dans la diversité/hétérogénéité du milieu (3D, morphologie réelle de grains). Les défauts que nous avons relevés portent sur la convergence numérique de la méthode EF : *(i)* des variations abruptes de la contrainte apparaissent d'un point d'intégration à l'autre dans un même élément et si le maillage n'est pas assez raffiné ces sursauts numériques ne sont pas négligeables par rapport aux variations de contraintes mécaniquement induites ; *(ii)* le comportement local et macroscopique est affecté par le choix des éléments cubiques : pour un nombre de points d'intégration fixé, la pente d'écrouissage est plus élevée avec des éléments à intégration réduite qu'avec des éléments à intégration complète ce qui laisse entendre que dans nos configurations de calcul, la part de la rigidité du maillage avec des éléments réduits à huit nœuds peut ne pas être négligeable par rapport à la rigidité propre du matériau. Retenons toutefois, au regard de simulations sur des maillages raffinés (plus de 5 éléments le long de chaque direction de l'espace dans chaque grain) présentées dans la section III.7, que ces défauts de convergence numérique locale tendent à disparaître en raffinant et qu'ils n'affectent les résultats que localement.

Chapitre -III-

Résultats aux différentes échelles

Sommaire

III.1 Introduction **45**

III.2 Conditions of the calculations **46**

III.3 Results **47**

III.3.1 Global scale 47

III.3.2 Phase scale 48

III.3.3 Intragranular level 51

III.4 The free surface effect **56**

III.4.1 Phase scale 56

III.4.2 Analysis in planes parallel to a free surface 57

III.4.3 Analysis in particular grains 59

III.4.4 Analysis on a line perpendicular to the free surface 59

III.4.5 Analysis on contour plots 60

III.5 Conclusion **62**

III.6 Complément de résultats à l'échelle macroscopique **63**

III.6.1 Détermination du VER de polycristal isotrope en terme de nombre de grains 63

III.6.2 Comportement élastoviscoplastique moyen d'un polycristal à élasticité hétérogène en chargement hydrostatique 65

III.7 Complément de résultats à l'échelle intragranulaire **68**

III.7.1 Traversées de microstructure 68

III.7.2 Comportement en fonction de la distance au joint de grain 70

III.8 Résumé des résultats **76**

Nous présentons dans ce chapitre l'ensemble des résultats obtenus avec les outils décrits dans le chapitre précédent. L'étude de la sensibilité de la modélisation à divers paramètres de calcul permet de se fixer ces paramètres en fonction de l'usage que l'on souhaite faire des résultats. En

l'occurence, comme nous comptons mener une analyse du comportement à l'échelle intragranulaire d'un polycristal isotrope, nous avons opté, dans un premier temps, pour un cube à 18^3 éléments quadratiques à 20 nœuds (27 points d'intégration par élément) représentant un agrégat d'INCO600 (cfc) à 200 grains. Nous nous intéressons particulièrement à la sensibilité des résultats aux conditions aux limites imposées à la structure pour un essai de traction simple : conditions homogènes ou mixtes sur le contour, faces latérales libres. L'autre aspect important de cette première analyse de résultats concerne la très forte hétérogénéité des réponses tant entre les grains qu'au sein d'un même grain. Tout ceci fait l'objet du deuxième article que nous avons rédigé en 1999 pour *International Journal of Plasticity* ('Part 2'). Il a été accepté pour publication dans sa version finale révisée en mai 2000, puis publié en avril 2001 (Vol. 17/4, pp. 537-563) dans le même volume que l'article 'Part 1'.

Ce chapitre est complété par des résultats ultérieurs à la rédaction de l'article, notamment à l'échelle intragranulaire : nous ne présentons pas seulement des résultats portant sur des grains particuliers de l'agrégat, nous effectuons une analyse du comportement local en fonction de la distance au joint de grain pour *tous* les grains de l'agrégat *m4* à 200 grains. Ceci constitue donc une caractérisation de l'influence des joints de grain en moyenne sur tous les grains. Nous vérifions qu'il y a bien une influence des joints de grain sur le comportement intragranulaire et que cette influence se traduit par une tendance moyenne sur tous les grains. Cependant l'analyse a été effectuée sur l'agrégat à 200 grains ce qui ne suffit pas à faire intervenir un nombre représentatif de grains de tailles différentes. Cet agrégat compte en effet deux grains de tailles distinctement plus grandes que le reste des grains ; leurs comportements révèlent des caractéristiques particulières que nous ne pouvons pas généraliser à tous les grains, faute de représentativité. Il faut donc retenir la méthodologie pour l'analyse du comportement en fonction de la distance au joint de grain, Elle sera utile pour une analyse de nouveaux résultats sur un agrégat comportant plus de grains, avec des tailles moins dispersées. C'est un travail en cours qui faira l'objet d'une prochaine communication.

Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates.
Part 2: results

Fabrice Barbe, Samuel Forest, Georges Cailletaud*

Centre des Matériaux/UMR 7633, Ecole des Mines de Paris/CNRS,
BP87, F-91003 EVRY, France

Abstract
The global, intergranular and intragranular responses of a polycrystalline aggregate are investigated. It is shown that the heterogenity of stress and strain dramatically increases from the global to the local level. Plastic deformation structures develop on a scale larger than the grain. Several types of boundary conditions are applied to polycrystalline aggregates, in order to estimate the importance of the surface effect. The results obtained are presented as contour plots on the cube, and a detailed study is performed to relate the variation obtained with the orientation of the grain and the position in the aggregate.

Keywords: crystal plasticity (B); elastic-viscoplastic material (B); polycrystalline material (B); finite element (C)

---

* Corresponding author: G. Cailletaud;
tel.: 33 1 60 76 30 56; fax: 33 1 60 76 31 50; e-mail: gc@mat.ensmp.fr

III.1 Introduction

In the first part of the present work [Barbe et al., 2001a], a numerical model has been proposed to simulate the mechanical behavior of a polycrystalline aggregate. In the second part, a particular aggregate (*m4*) is depicted in detail, in order to characterise the homogenised response of the material, but also the stress or strain heterogenity. This heterogenity can be assessed by applying some averaging operations of the given fields on all the grains with the same crystallographic orientation, on a specific grain, or by considering the local values. It will be shown that the scatter increases dramatically when a local value is considered. Besides, special attention should be paid to the variability of these quantities according to parameters like the volume of a grain, the distance to a free surface or the distance to the grain boundary. However, a more complete modeling and characterisation of polycrystalline plasticity would require to take into account more parameters. For this purpose the number of grains within the polycrystal and the absolute grain size might be two of the essential parameters. This problem is briefly tackled in section III.3.1.

In section III.2, the conditions of the F.E. calculation are described, and the reference calculation using the self–consistent formalism is performed. After comparing the global loading curves and the stress–strain curves on each phase for these two approaches in section III.3.1, the end of the paper concentrates on the local fields (section III.3) and on the effect of a free surface (section III.4). The plasticity mechanisms are studied through stress and strain fields, but also quantities like the number of active slip systems or the amount of plastic slip. This latter is defined as the sum of the plastic slips over the systems ($\sum_s |\gamma^s|$) so it does not necessarily evolves as an equivalent deformation. Contour plots are shown in section III.3.3 and III.4. The analysis of the surface effect is conducted with representations of the distribution of internal variables on different spaces: along a particular line, on contour plots and with averaged values in planes parallel to the free surface. Several boundary conditions are investigated, in order to extract the surface effect from the local scatter due to stress redistribution: uniaxial tension with four lateral faces left free of forces on the one hand, fully prescribed strain on the other hand, and intermediate cases with only prescribed axial strain. The importance of the surface effect can then be qualified by comparing it to the intergranular redistribution.

The motivation of such a study has to be found in the literature, specially in articles dealing with the study of the surface effect from a metallurgical point of view. Extensive transmission electron microscopy studies of deformed single crystals at the applied stress–state of early works [Fourie, 1967, Mughrabi, 1970, Ungar et al., 1982, Pangborn et al., 1981] showed the propensity of the near surface region to harden with dislocation arrangements and densities different from those observed in the crystal interior. Still the effects observed are controversial [Mughrabi, 1992]: a *hardened surface* layer was found in experiments on copper [Pangborn et al., 1981]; the change in mechanical properties was related to the dislocation density, which was higher than in the bulk of the crystals. Besides, other works [Fourie, 1967, Mughrabi, 1970] displayed the inverse effects of a *softening surface* region where dislocation densities are lower and cell dimension larger than in the crystal interior. In the case of multiple slip [Ungar et al., 1982], no conclusion could be drawn. Actually, the experimental study of such an effect is a very difficult task. The observations can be modified due to the presence of the oxide layer, which may introduce local overstress.

This explanation was for instance proposed by some authors [Nakada et Chalmers, 1964] after tests on aluminium and gold single crystals: the surface film is work–hardened for aluminium (where an alumina layer is present), but not on gold. Similarly, the conclusions on single crystals can be different from those on polycrystals. The mechanical approach can bring new results, which can be helpful for the general discussion. Note that the calculations are performed with a crystallographic model, which means that slip is the only deformation mechanism. Accordingly, the effect of the local orientation will be significant. Still, the model properties are independent of the distance to the surface, or of the distance to the grain boundaries. The effect which can appear in the computation at the level of the integration point has to be related to the local balance of momentum, and to the local stress redistribution. There is no specific effect like dislocation pile-up, image force ... The purpose of the modeling is precisely to address the question of the reliability of the mechanics as it is applied at the microstructural scale.

Other attempts have recently been made to evaluate the surface effect numerically [Pilvin, 1998, Sauzay et Gilormini, 1999, Barbe et al., 1999]. While the first two approaches consider a crystallographic inclusion in a homogeneous semi–infinite medium, in the third, the analysis is based on finite element simulations of polycrystalline aggregates. The work of Pilvin enables to characterise a new concentration rule, for evaluating the stress in the inclusion, depending on the distance to the surface. Due to the decrease of the constraint near to the surface, the concentration rule tends to a Reuss type model while the strain heterogenity increases. The perturbation due to the surface approximately corresponds to 3 or 4 grains in depth. The work of Sauzay and Gilormini considers cyclic loadings, but is restricted to an elastic homogeneous medium, having in view High Cycle Fatigue modeling. With only one slip system in the inclusion it is shown that the surface effect strongly depends on the crystal orientation. These conclusions may have to be revisited when the influence of a realistic local microstructure is introduced.

III.2 Conditions of the calculations

The aggregate called *m4-200-200* [Barbe et al., 2001a] is now studied in details, with a $18 \times 18 \times 18$-element-mesh, as justified in the part 1 of the article. It contains 200 grains randomly oriented. The geometry of the microstructure is represented with finite elements in fig. 6c of the first part and the material parameters are given in section 3.2 of the first part.

In the following sections the type of boundary conditions is systematically specified. It is one of the four loading cases defined below:

– *homogeneous strain boundary* conditions (HSB), corresponding to a prescribed mean deformation $\underset{\sim}{E}$ of the aggregate. All components of the displacement vector at each node (position $\underline{x}$) of the outer boundary of the cube are prescribed according to:

$$\underline{u} = \underset{\sim}{E}.\,\underline{x} \quad \Longrightarrow \quad < \underset{\sim}{\varepsilon} > = \underset{\sim}{E} \tag{III.1}$$

This prescribed strain $\underset{\sim}{E}$ is obtained from the BZ homogenisation model [Berveiller et Zaoui, 1979] presented in the part 1. The model is integrated in uniaxial tension, that is under prescribed axial strain and a null stress on all the other components. This should also lead to a zero resulting force on the lateral faces if the F.E. computation is in agreement with BZ model.

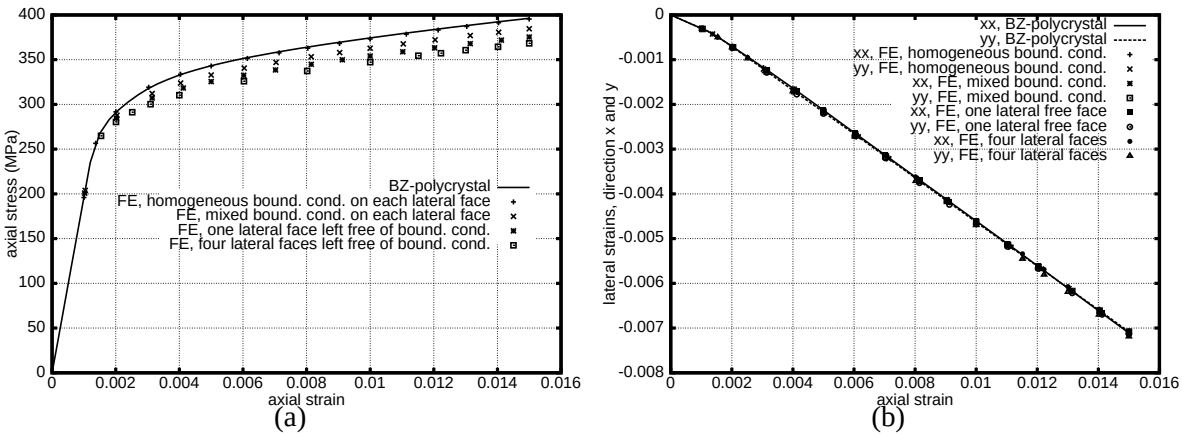


Figure III.1 : Simulations of tensile tests to 1.5% axial strain, from BZ-homogenisation and F.E., with different loading conditions: (a) axial stress *vs* axial strain, (b) lateral strains *vs* axial strain

– a *mixed* type of *boundary* conditions (MB), where normal displacements are imposed to the faces of the cube. The in-plane displacements of the faces are thus let free. These normal displacements correspond to the prescribed strain $\underset{\sim}{E}$.

– *one* lateral *free face* (1FF), where the axial displacement is imposed on the top and bottom faces, and three of the four lateral faces are subjected to the prescribed normal displacement defined above,

– *four* lateral *free faces* (4FF), where the axial displacement is imposed only on the top and bottom faces.

A comparison of the local behavior according to the load case is detailed in section III.4. Fig. III.1 allows a first comparison on a macroscale.

III.3 Results

III.3.1 Global scale

Since random orientations have been assigned to the grains in the aggregate *m4-200-200* under concern here, each grain is considered as a new phase. It can be seen in fig. III.1 that the agreement between the mean values obtained from the F.E. analysis and the prediction of the homogenisation model is good. The BZ curve obtained with the RVE simulation exactly fits the response of the F.E. HSB calculation. As expected, the F.E. response is softer and softer when the boundary conditions are released: at the end of the tensile load, the axial stress value is 396.3 MPa with BZ model, 395.4 MPa with HSB, 384.5 MPa with MB, then 375.3 MPa for 1FF and 368.3 MPa for 4FF. The maximum difference between the different types of load is then 7%. The fact that the variation of the overall response remains reasonably low indicates that the considered volume element containing 200 grains with random orientations is not far from being a Representative Volume Element (RVE) as defined in the homogenisation theory [Huet, 1990].

The question of the minimum size of a RVE for a polycrystalline aggregate remains a central and unsolved question of the mechanics of heterogeneous materials. Actually the answer depends on the loading conditions and on the texture of the material. The present numerical tool can be used to study the transition from the multicrystal to the actual polycrystal behavior. If the number of grains is not large enough, several realisations of the distribution must be considered, as done in the part 1. Such a transition has been studied for the torsion of copper wires [Quilici et al., 1998]: a typical number of 1000 grains in the cross section of a cylindrical specimen has been found, that is about 30 grains in the diameter. The polycrystalline cube considered here is made of a smaller number of grains but is not far from being a RVE at least for tensile overall loading conditions.

Moreover, as shown on fig. III.1b, the tensile tests responses in the x direction for the four cases of boundary conditions all fall onto the responses in the perpendicular y direction, which confirms the isotropic behavior of the bulk. Thus it is demonstrated that the self–consistent modeling is reasonable when 200 grains are involved in an aggregate, and that the aggregate can be considered approximately as isotropic. More complex loading conditions should be applied to the aggregate to confirm the isotropic nature of the overall material response.

III.3.2 Phase scale

The averaged responses of the grains are quite inhomogeneous. As shown on fig. III.2c,e where the mean stress-strain behavior of each of the 200 grains is plotted, some phases work in tension as imposed by the global load, whereas others work in compression as soon as plastic strain occurs. This is a direct consequence of the interaction between grains; in such a configuration the response does not depend only on the crystallographic orientation but predominantly on the constraints due to neighboring grains, until the overall applied deformation affects once again the compressing regions. All the phases then work in tension. It is also worth noting how scattered those curves are, in comparison with the mean stress-strain response and with the behavior of each of the four basic orientations (cf part 1 of the article). This interaction between grains leads to strongly non-proportional mean stress evolution, as demonstrated on the $(\sigma_{yy} - \sigma_{zz})$ plane on fig. III.3. Since the grain elasticity is chosen isotropic, all the grains are equivalent up to the onset of plasticity, at $(\sigma_{yy} = -74MPa, \sigma_{zz} = 148MPa)$, then the plastic flow produces contradictory evolutions according to the grain: the lateral stress σ_{yy} can either increase or decrease.

The major role played by the neighboring grains on the behavior of an individual grain can be assigned to the number of surrounding grains: from ten to twenty grains differing from their size, morphology, position in the bulk and orientation, that is ten to twenty ways to behave. A first classification of the grains is made according to their volume on fig. III.4a, and III.5a. The final state of all the grains is shown in fig. III.4a, together with the macroscopic curves. The symbol chosen for each grain depends on its volume (resp. less than 3, between 3 and 30, more than 30, in all simulations the volume of 1 element is taken equal to 1), in order to check if there is a numerical artefact due to the small size grains. It is observed that the smallest grains present the biggest discrepancy with respect to the reference state. Such a spreading might also be due to the influence of a surface: as seen on fig. III.4b the smallest grains are often the closest to the surface. However, if the smallest grains are excluded from the analysis, the variation remains large ($\pm 30\%$) for grains having a volume superior to 27, *i.e.* for grains described by $27 \times 27 = 729$ integration points. This variation characterises the neighborhood effect, and the grain-to-grain interaction. It is also illustrated on fig. III.5a,b where grains are also classified according to their normed axial stress and their distance to the surface. The normed stress is defined by the ratio of the stress from

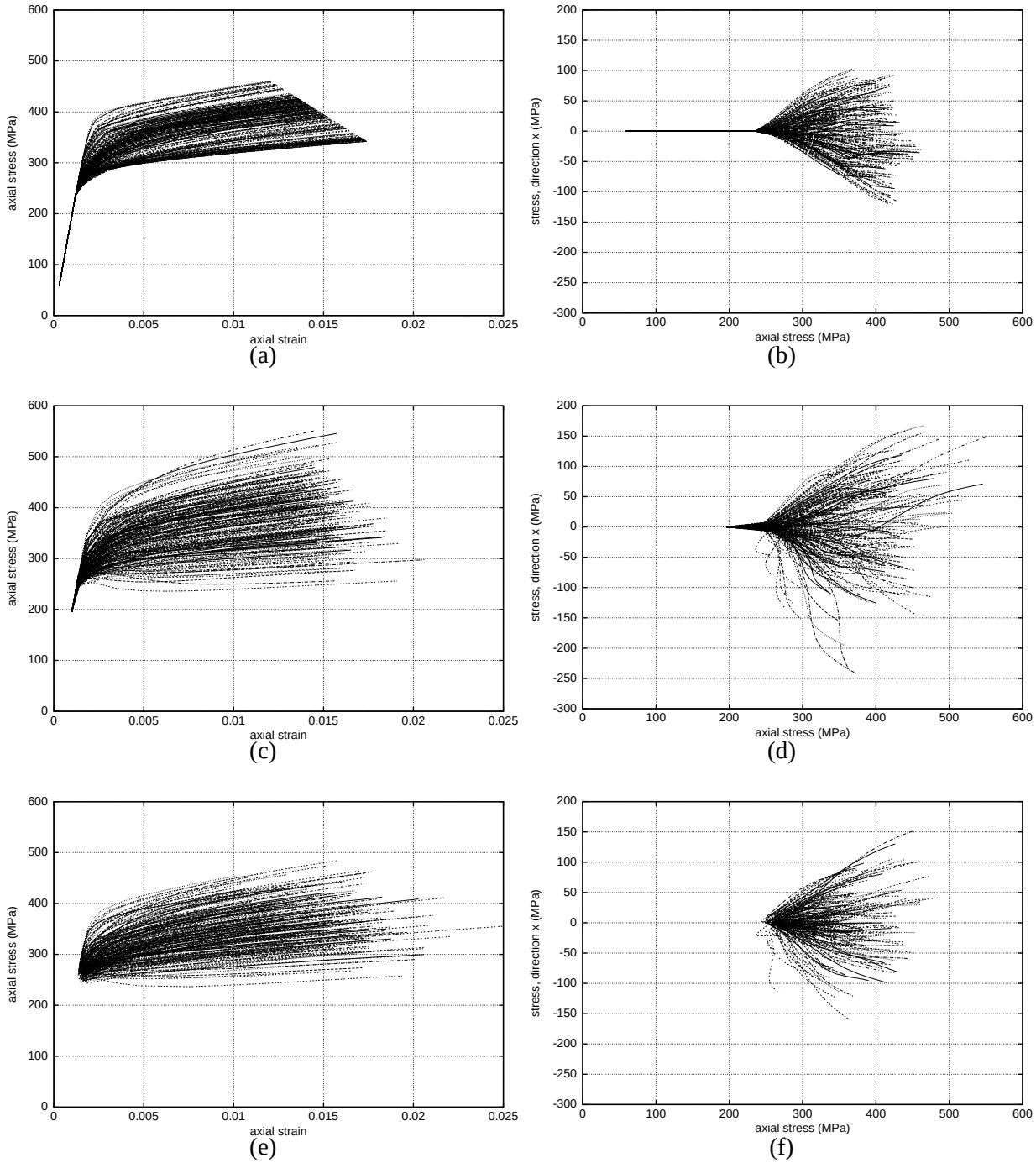


Figure III.2 : Illustration of inter- and intra-granular heterogenity from the mean response of each of the 200 grains of the polycrystal: (a,b) BZ-homogenisation; (c,d) F.E. HSB; (e,f) F.E. 4FF; (left) σ_{zz} *vs* ε_{zz}, (right) σ_{xx} *vs* σ_{zz}

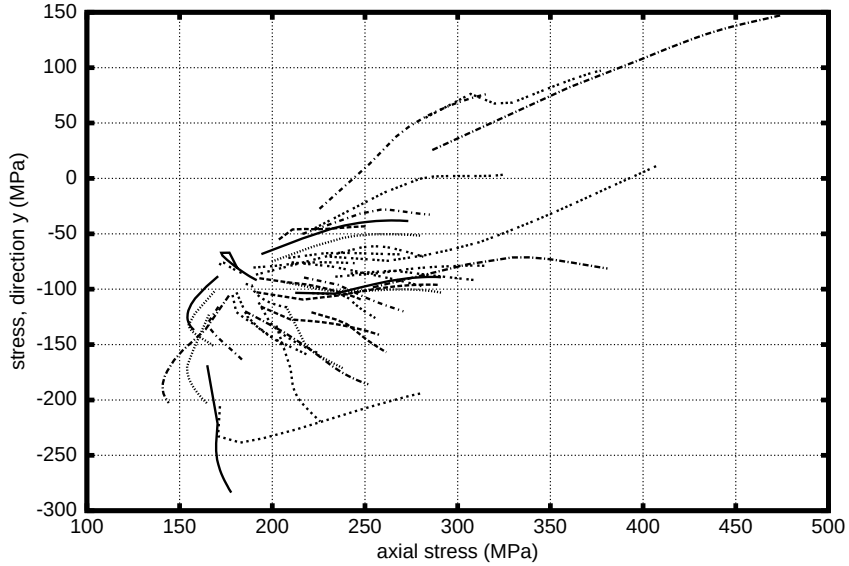


Figure III.3 : Mean stress paths in each of the 200 phases of the polycrystal tensile strained at 1.5% with isovolumic conditions

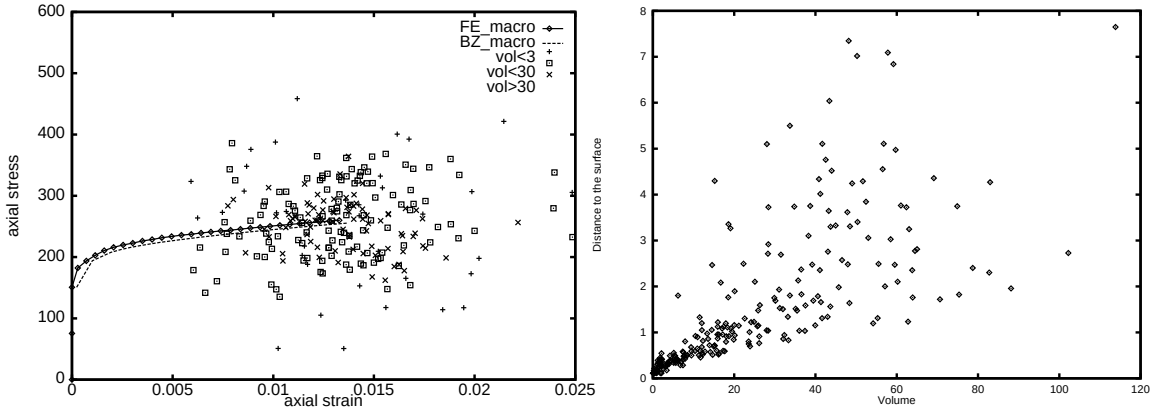


Figure III.4 : (left) final state in the stress-strain plane for all the grains according to their volume, (right) volume of the grain *vs* distance to the surface of the aggregate

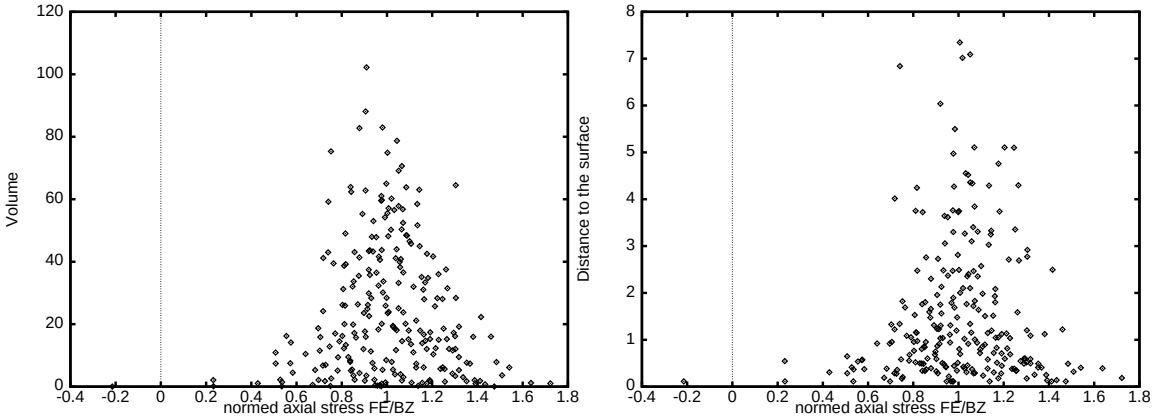


Figure III.5 : Stress heterogenity between the grains according to (left) their volume, (right) their distance to the surface

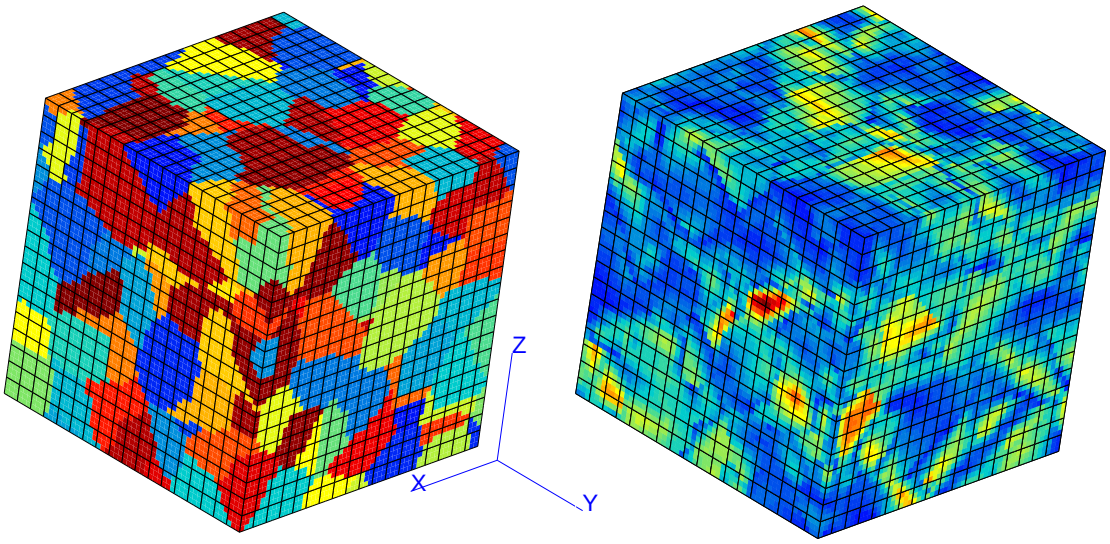


Figure III.6 : (left) Grain map, (right) contour of the norm of the lattice rotation vector at the onset of plastic deformation

F.E. divided by the stress from the homogenisation model. The variation is quantified by the width of the cloud of points at a given height of the diagram. For example, grains in the core of the aggregate [resp. the biggest grains], behave nearly as predicted by the homogenisation model. But as soon as a grain nearer the surface is considered [resp. a smaller grain], a larger dispersion of behaviors is displayed. Since the behavior of the grains in the near surface region have proved to be particularly influenced by their neighbors and because of the controversy on that subject exposed in the literature, a study is conducted in section III.4 on the effect of the boundary conditions for a tensile test, which is specifically a study of the free surface effect in a purely mechanical sense.

III.3.3 Intragranular level

After considering the heterogenity at the scale of the phases, the final step of the analysis of the F.E. results concerns the Gauss points. Three main features result from the observation of the plastic strain fields in the aggregate (fig. III.6 and III.7):

Development of plastic deformation structures

The plastic deformation distribution in an aggregate is generally not dictated by the given geometry of the microstructure. In particular, the geometry of grain boundaries does not directly appear on the contour plots (see *e.g.* fig. III.7a,b that feature the distribution of cumulated strain on slices taken in the core of the bulk or see fig. III.8 reporting the distribution of plastic slip on an external face of the aggregate). In contrast, deformation meso-structures develop like deformation bands that go across several grains. Percolated dissipation structures seem to find their way through the random distribution of grains. Those features can be observed with better accuracy on the contour of *m4* discretised into $24 \times 24 \times 24$ quadratic elements presented in the part 1 of the article. If the kinematic hardening term is removed from the constitutive laws, similar internal deformation structures form on the contour as well as in the interior. Two pieces of information are then confirmed: (*i*) the meso-structures of deformation develop at the earliest stages of plastic slip; (*ii*) with $72 \times 72 \times 72 = 373248$ integration points to represent the microstructure containing 200 grains, the convergence in the thickness and refinement of the meso-structures does not seem to be attained.

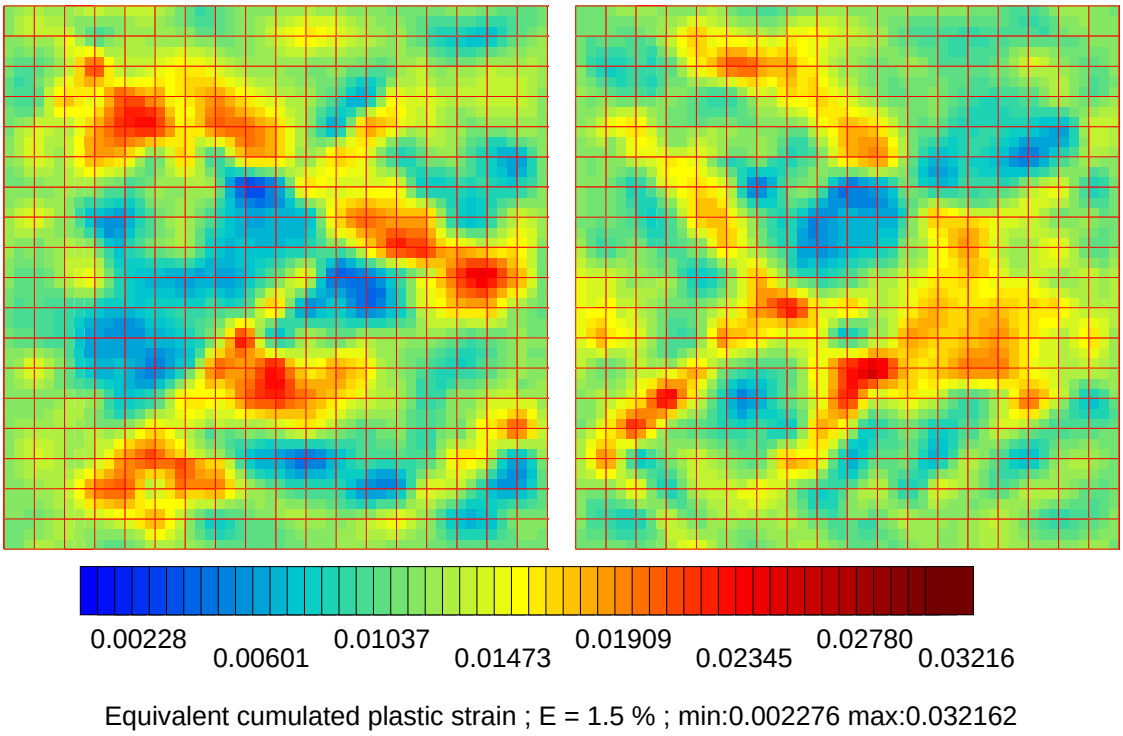


Figure III.7 : Contour of the equivalent cumulated plastic strain on two slices of the interior bulk: (left) slice perpendicular to the *x* axis, (right) slice perpendicular to the *y* axis

Direct effects of grain boundaries

In the contour plots of some specific variables, the shape of the grain boundaries can be clearly seen. This is the case for instance for the resolved shear stress or for the number of active slip systems, as shown previously [Quilici et Cailletaud, 1999]. Interestingly, the distribution of lattice rotation also reveals the grain boundaries. For that purpose, the model of single crystal plasticity used in this work has been extended to include effects of small rotations. The gradient of the velocity field is divided into symmetric and skew-symmetric parts according to:

$$\dot{u}_{i,j} = \dot{\varepsilon}_{ij} + \omega_{ij} \tag{III.2}$$

$$\omega_{ij} = \omega^e_{ij} + \omega^p_{ij} \quad \text{with} \quad \omega^p_{ij} = \sum_s \frac{1}{2}\dot{\gamma}^s \left(m^s_i n^s_j - m^s_j n^s_i\right) \tag{III.3}$$

The elastic part ω^e_{ij} accounts for the lattice rotation rate with respect to the reference space frame and, as a skew-symmetric tensor, can be represented by a pseudo-vector and integrated. The local redistribution of the norm of the lattice rotation vector around the grain boundaries is shown on fig. III.6. Lattice rotation can be maximum near the boundary or in the core of the grain, but the lattice curvature associated with the gradient of the lattice rotation vector is always maximum near the grain boundaries.

Intragranular stress state

The overall integration points of one grain are considered in fig. III.9; their response is given at three strains ($E = 0.5\%$, 1.0%, 1.5%), together with the mean response of the grain and the

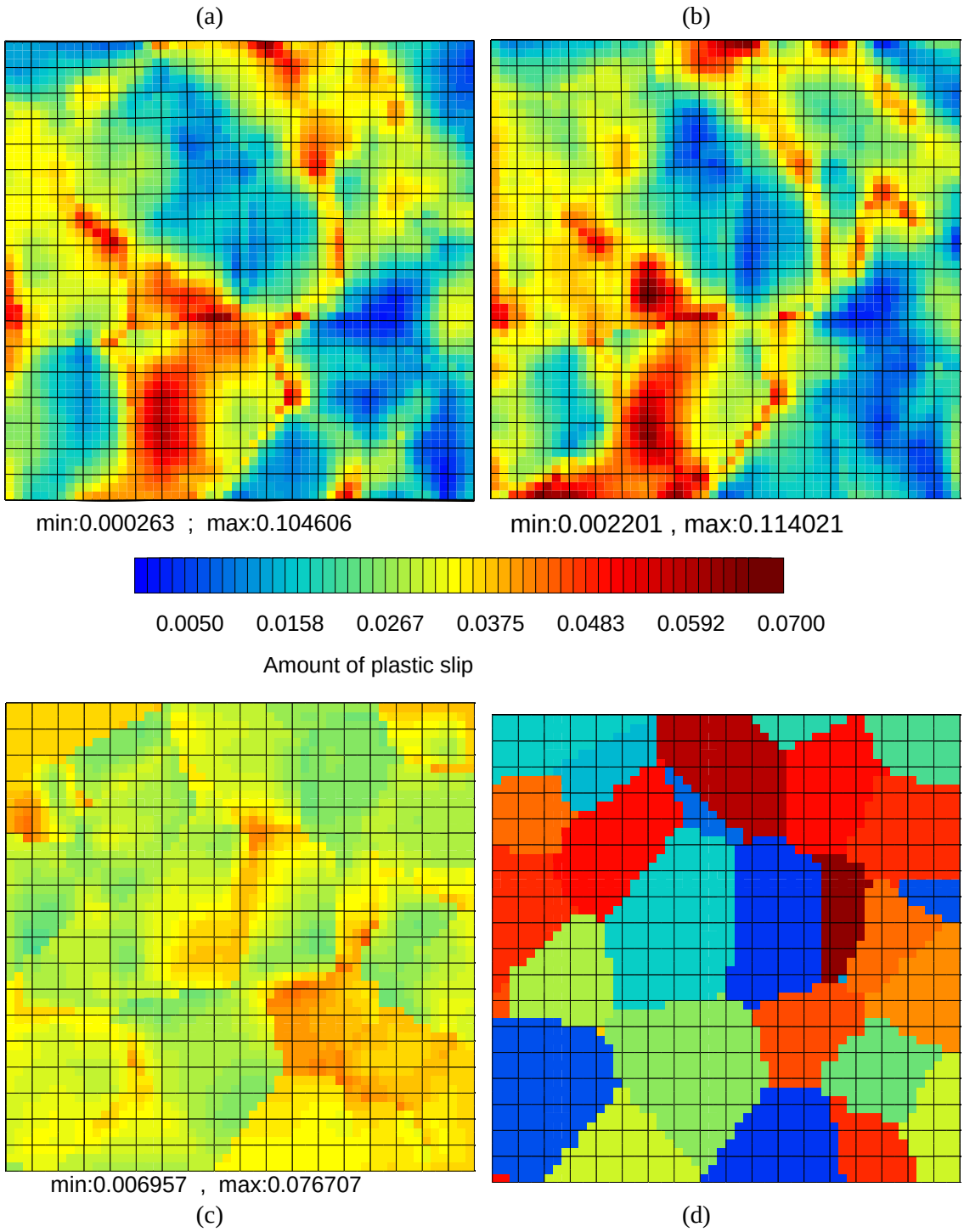


Figure III.8 : Contour of the amount of plastic slip on a lateral face of the polycrystal subjected to the conditions (a) 4FF, (b) MB, (c) HSB; (d) associated grain map

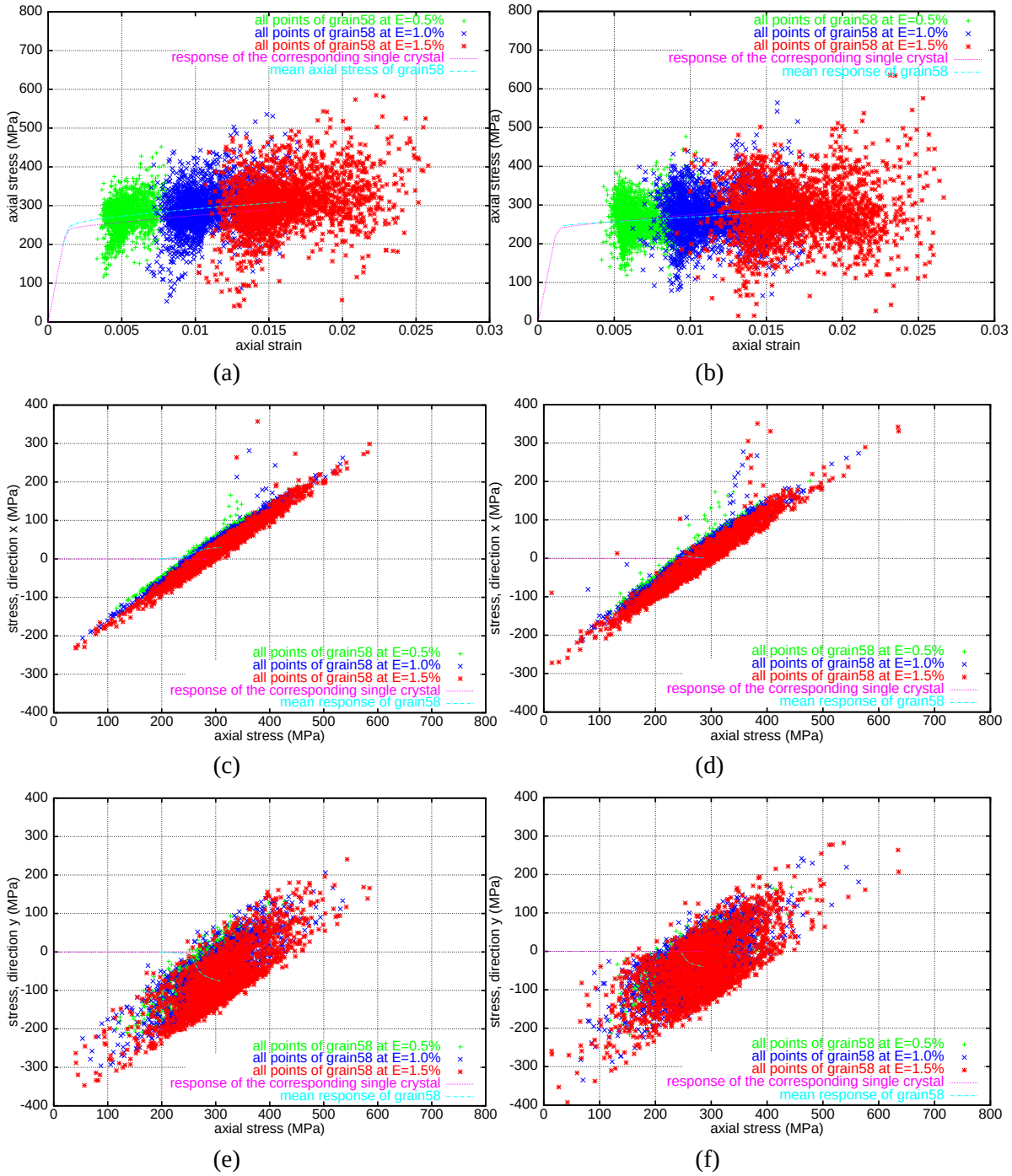


Figure III.9 : Intragranular heterogenity and effect of the free surface: responses at three strains ($E = 0.5\%$, 1.0%, 1.5%) of all the points within *grain58* (2265 points); (a, b) σ_{zz} *vs* ε_{zz}; (c, d) σ_{xx} *vs* σ_{zz}; (e, f) σ_{yy} *vs* σ_{zz}; (left) case F.E. HSB, (right) case F.E. 4FF

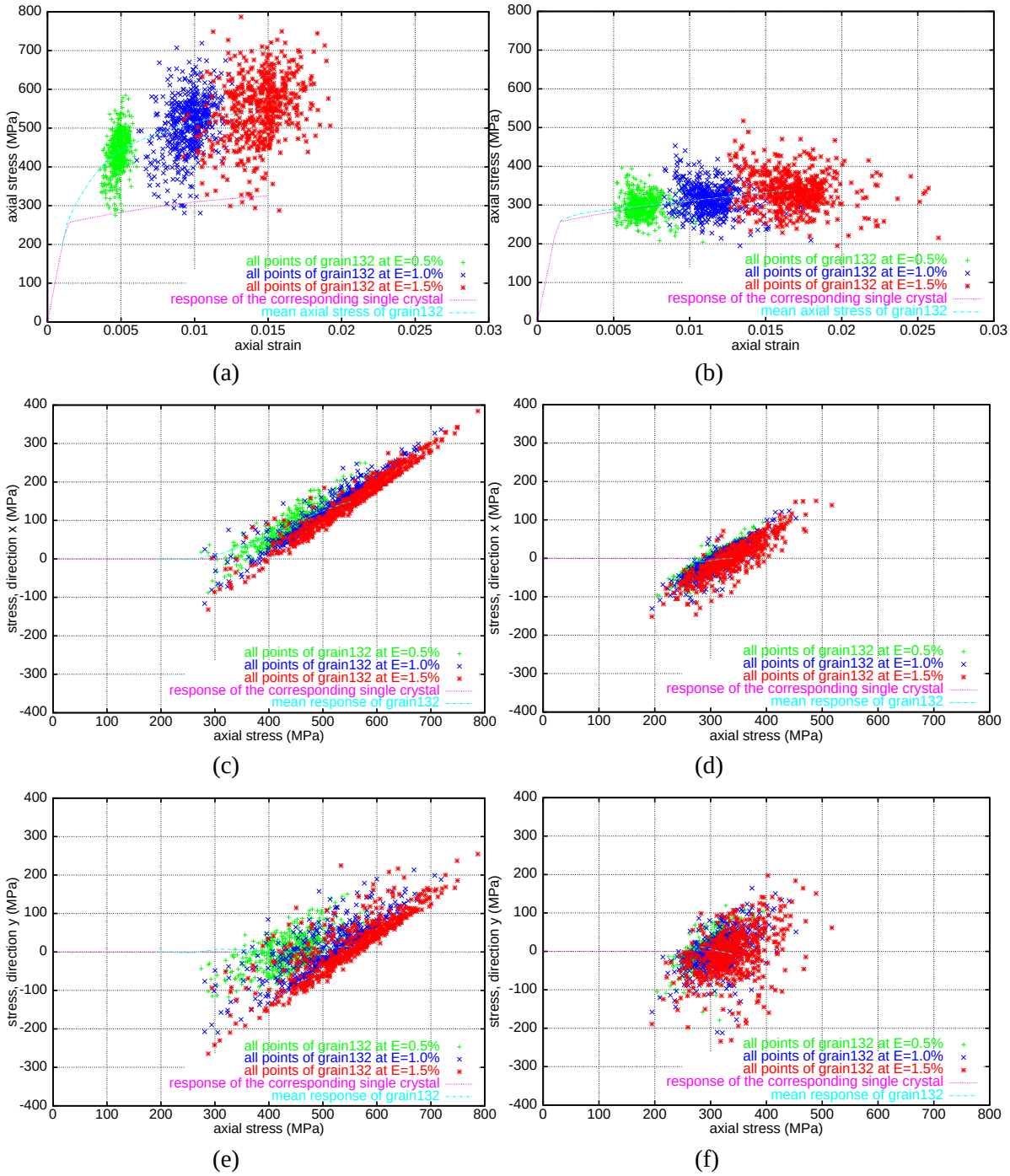


Figure III.10 : Intragranular heterogenity and effect of the free surface: responses at three strains ($E = 0.5\%$, 1.0%, 1.5%) of all the points within *grain132* (545 points); (a, b) σ_{zz} *vs* ε_{zz}, (c, d) σ_{xx} *vs* σ_{zz}, (e, f) σ_{yy} *vs* σ_{zz}; (left) case F.E. HSB, (right) case F.E. 4FF

response of a single crystal having the same orientation in tension up to 1.5%. The local stress-strain curve shows again more and more scatter; even under macroscopic tensile load, the local stress in the tensile direction can be compressive at some locations of the aggregate. The range of intergranular heterogenity can be compared to the range of intragranular heterogenity: the mean responses of all the grains in polycrystal (*m4-200-200*) are plotted with the same scale as the responses of the integration points within the biggest grain (*grain58*) of the microstructure. On the axial stress-strain curves, the range of heterogenity is greatly more pronounced among points within a grain than among grains within a polycrystal. In the latter case, the averaging effect partially erases the local variations. Obviously the points within a multiphase structural element (element with several crystallographic orientations assigned to the integration points) need to be excluded from the analysis because the way their behavior is affected by the neighboring points is still obscure. However, as seen in fig. III.10, which corresponds to a grain containing less integration points, the heterogeneous behavior remains characteristic of the intragranular behavior and the range of heterogenity is still comparable to that observed with mean responses of grains within the polycrystal (fig. III.2c,e). It highlights the fact that the heterogenity within a grain, produced mostly by the neighboring mechanical constraints, could be a clue in the modeling of damage in polycrystalline aggregates.

The difference in the behavior within a grain in comparison with the one within a polycrystal is emphasised when considering the local stress paths. Fig. III.9 and III.10 display the typical stress path observed in *grain58*: as a matter of fact, the lateral stress σ_{xx} and the axial stress σ_{zz} seem to be related by a simple expression like :

$$\sigma_{zz} - \sigma_{xx} = \sigma_Y \tag{III.4}$$

where σ_Y refers to the actual yielding stress, which increases as the load is applied. This is particularly well illustrated if only three strains of the load are represented ($E = 0.5\%, 1.0\%, 1.5\%$). As the deformation proceeds and as the elastic limit is raised, the line of gradient equal to 1 follows the mean response of the grain by moving to the right. This curve should be replotted in terms of principal stresses, to fit with Tresca criterion. But, even in the present form, it highlights the constraint effect in the grains, leading to 3D fields, and it is typical of the local behavior of each point. Yet, because of the scale transition which produces additional hardening, this relation is not valid anymore concerning the mean stress paths in the grains within a polycrystal, as shown in fig. III.2b,d,f. This observation is true either for the behavior predicted by the homogenisation model or for the mean behavior per grain issued from F.E..

III.4 The free surface effect

III.4.1 Phase scale

Comparison of the effective stress-strain curves from the four loading conditions was given on fig. III.1 and showed a maximum difference of 7% between the extremal cases of HSB and 4FF. The comparison between those two extremal cases is now transferred to the level of the grains on fig. III.2: the mean responses in each grain, according to BZ-homogenisation model, F.E. HSB and F.E. 4FF respectively are plotted. The case of HSB displays the most heterogeneous intergranular behavior, on the axial stress-strain curves as well as on the loading paths expressed with stresses. To quantify the difference in the range of heterogenity, the maximum stress-strain response in each case has been extracted and compared with F.E. HSB. Note that the most hardened grain in the

case of HSB is not the most hardened in the BZ-polycrystal, neither in the case 4FF. Anyway, the purpose is not to identify and characterise the grains individually but only to evaluate the discrepancy between different simulations of tensile test as the scales of representation are refined (from macro to micro via meso). So, the maximum response obtained with BZ-polycrystal differs from the one of F.E. HSB by -16.4% whereas the one of F.E. 4FF differs by -12.2%. About the minimum responses, the difference reaches $+33.72\%$ in the case of BZ-polycrystal and stands at $+0.75\%$ in the case of 4FF.

Thus the comparison at this scale allows us to calibrate the limitations of the homogenisation model with the assumption of mean fields in the phases: despite the very good agreement at the global scale (0.22% on the axial stress at 1.5% axial strain), the fields in the actual material reflect disordered behaviors among grains that cannot be captured with the simplified model; for instance, on fig. III.2a the distribution of the axial stresses on a line of gradient equal to $\alpha \times \mu$ (α and μ being defined in the transition rule (9) in Part 1 of the article) at the end of the load is valid on average for many orientations, but may be inadequate to represent the real behavior of an individual grain with the same orientation.

III.4.2 Analysis in planes parallel to a free surface

The behavior is represented according to the distance to a lateral free face (y=0) in fig. III.11. This face is free for the case 1FF, and for 4FF, and is submitted to the conditions defined in section III.2 for HSB and MB. Several types of variables are averaged in planes parallel to that lateral face. The effect of the applied boundary conditions can then be checked on average, independently of the local variation due to the environment of each grain. The von Mises stress (fig. III.11a) is lower by 12% in case 4FF than in case HSB near the surface region; it also has to be noted that MB case is not far from 1FF and 4FF cases: letting free the in-plane displacements on the lateral sides of the cube produces a significant stress relaxation. The von Mises strain ($((2/3)\underset{\sim}{\varepsilon}^p : \underset{\sim}{\varepsilon}^p)^{0.5}$) (fig. III.11b) and the cumulated plastic strain ($\int (2/3)\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p : \dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^p)^{0.5} dt$) (fig. III.11d), which respectively quantify the actual plastic strain state and the length of the macroscopic plastic strain path, give the same information. They show that the strain is lower for the case of constraint boundary conditions (20% lower near the surface for HSB compared to 4FF). Fig. III.11c shows the evolution of the amount of plastic slip: it is defined as the sum of the slip over the systems ($\sum_s |\gamma^s|$). Contrary to the deformation, it is bigger near the surface for HSB than for the other cases. The fact that more plastic slip finally induces less strain for HSB can be explained by fig. III.11e,f, which demonstrates that the value of the larger slip (fig. III.11e) is lower for HSB, and that the number of slip systems (fig. III.11f) is larger, leading to a competition between the systems. In the case of free boundaries, the predominant slip benefits from "more space" to develop, and produces important strain, whereas in the case HSB, the action of predominant slip remains limited by the other systems, which develop to reduce strain incompatibilities.

Considered altogether, those effects, which appear to be the same on either side of the aggregate, lead to the observation of *softened free surfaces* where both axial stress and plastic slip proved to be lower in the near surface region when no condition is imposed to this surface. Besides, the free surface enables the loading paths in its neighborhood to be more proportional than in the case of a surface with homogeneous strain conditions.

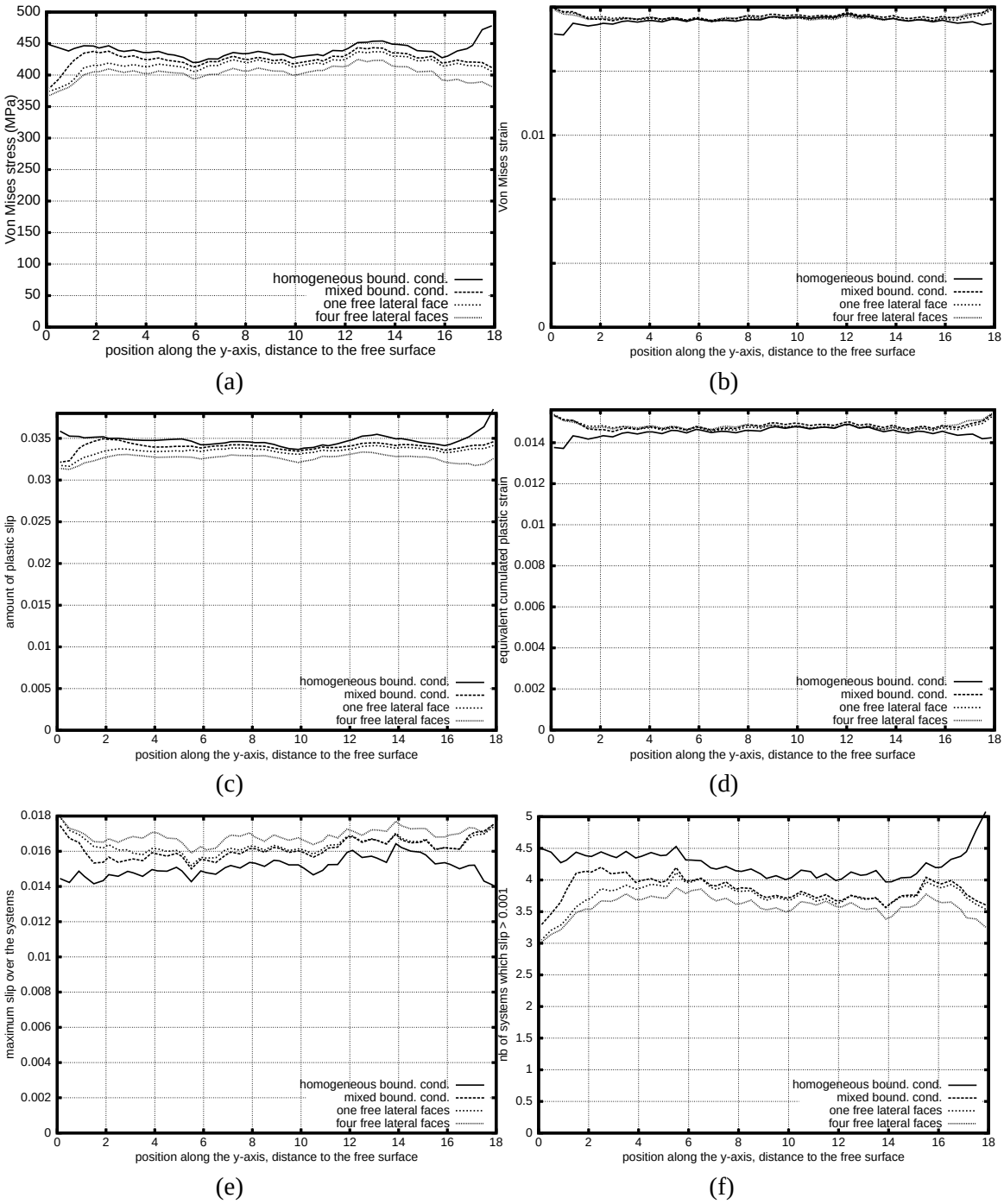


Figure III.11 : Variables averaged in planes parallel to a lateral face of the polycrystal in the four cases of load: (a) equivalent stress, (b) equivalent strain (c) amount of plastic slip, (d) equivalent cumulated plastic strain, (e) maximum plastic slip over the twelve systems, (f) number of slip systems whose plastic slip exceed 0.001

case of load	grain58 (the biggest)	grain132 (the hardest)
Single crystal	2 0.0164	3 0.0259
Polycrystal HSB	10 0.0138	8 0.01388
Polycrystal 4FF	10 0.0156	5 0.0184

Tableau III.1 : Effect of the free surface on the mean behavior in particular grains: number of active slip systems together with the maximum cumulated slip

III.4.3 Analysis in particular grains

The previous remarks can be made for particular grains studied in fig. III.9 and III.10. They show the response at each point of *(i)* the biggest grain of the aggregate (*grain58* described with 2265 points) and *(ii)* the most hardened grain (*grain132*). The average number of active slip systems in these grains has been counted: they are defined as the systems where cumulated slip has exceeded 0.00001 during the tensile test. The maximum cumulated slip averaged in those grains are also given in table III.1. The behavior of those particular grains is compared to the one of the single crystals with the same orientations. The agreement about the average amount of cumulated slip in *grain58* is admittedly good: this grain is very large so there might be some places of the grain which are not influenced by its neighbors; furthermore, due to its position in the core of the aggregate, it is surrounded by a large number of grains with different orientations thus forming a quasi-homogeneous surrounding medium, as in the self-consistent scheme. But the number of active slip systems fails to be reproduced when the crystal is embedded in the aggregate. About *grain132*, there is no comparison to be made. The grain is too close to the boundary and too small to be associated to the behavior of the single crystal. However, a direct effect of the interaction with a free surface lies in the number of activated slip systems depending on the loading condition studied: whereas only 5 systems contribute to the deformation in the case 4FF, 8 slip systems are required for the accommodation of the deformation of the grain under HSB.

III.4.4 Analysis on a line perpendicular to the free surface

The analysis is then pursued deeper into the microstructure: the evolution of the local strains along the integration points of a straight line going from a lateral side of the bulk to the other is shown on fig. III.12. Considering the amount of plastic slip, we can deduce that (*i*) the intergranular compatibility forces the grain boundary region to deform more than the core of the grain, (*ii*) the deformation pattern in some grains is predominantly influenced by the neighboring grains, more than by the crystallographic orientation, (*iii*) the interaction with the boundaries of the bulk is of the same order as the effect of a free surface (about 20%) since the discrepancy between two cases of load in F.E. is of the same order as the difference between the response of the homogenisation model and the response of the F.E. computations.

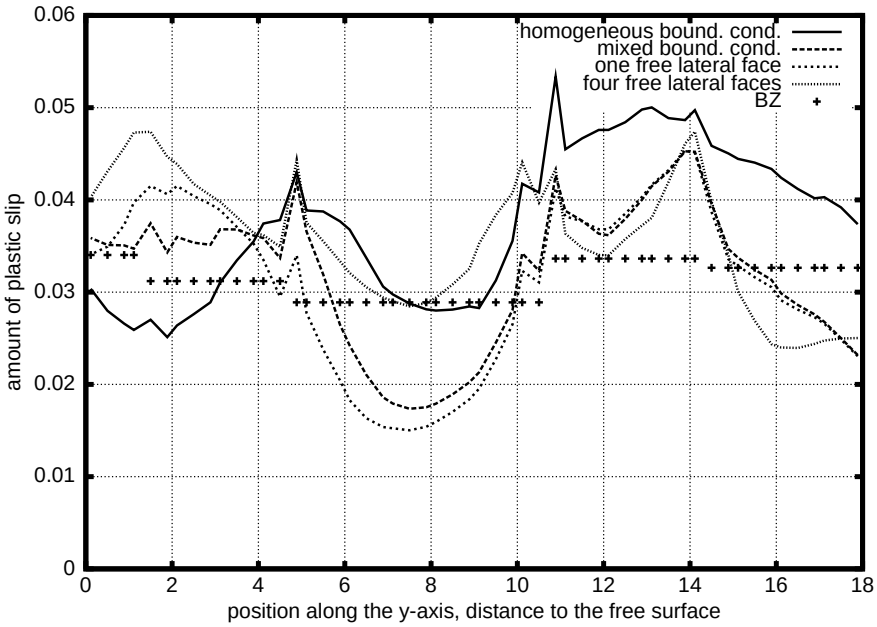


Figure III.12 : Evolution of the amount of plastic slip on a line perpendicular to the free surface of the polycrystal in the four cases of load; the line is located in the core and goes from side to side

III.4.5 Analysis on contour plots

Fig. III.8 and III.13 illustrate the local effect of a free surface on the external contour of the aggregate. They confirm the effects observed with averaged values: the amount of plastic slip, for instance, reaches larger values in the case 4FF than in the case of HSB. As a natural consequence, the distribution of plastic slip appears more heterogeneous in the case of a free surface. This remark is consistent with the comparison made on the axial stress: larger averaged stress (case HSB) can also be associated with a more heterogeneous field.

Fig. III.13 combined with fig. III.8 also provides interesting information about the mechanisms involved in the accommodation of the deformations of the grains at the surface of the cube: as it was found experimentaly [Zehetbauer et al., 1999, Ungár et al., 1998] and by simulations [Teodosiu et al., 1991, Harder, 1999], internal stresses appear larger near the grain boundaries than within the grain interiors, more particularly in the cases of mixed boundary conditions. The regions with high stress levels are commonly considered as those where dislocation densities are the highest [Teodosiu et al., 1991]. Moreover, according to [Liu et al., 1998], the majority of the dislocations at the grain boundaries are related to active slip systems predicted by a Schmid factor analysis. Consequently, since the resolved shear stress on a slip system is related to the stress in the grain through a Schmid factor, the resulting slip activity provides some qualitative information on the dislocation density. As the amount of plastic slip defines the sum of the slip over the slip systems, a region where the amount of plastic slip is the most pronounced may correspond to a region of high amount of stress, specially if it is close to a grain boundary. This is consistent with the observed contours of the amount of slip (fig. III.8): the regions of high amount of stress are also those of the most developed plastic slip (which is not necessarily true about the equivalent deformation).

Consequently, as the aggregate subjected to HSB proved to produce the highest amount of plastic slip (fig. III.11c) as well as the highest amount of stress, the effect observed can be said to be

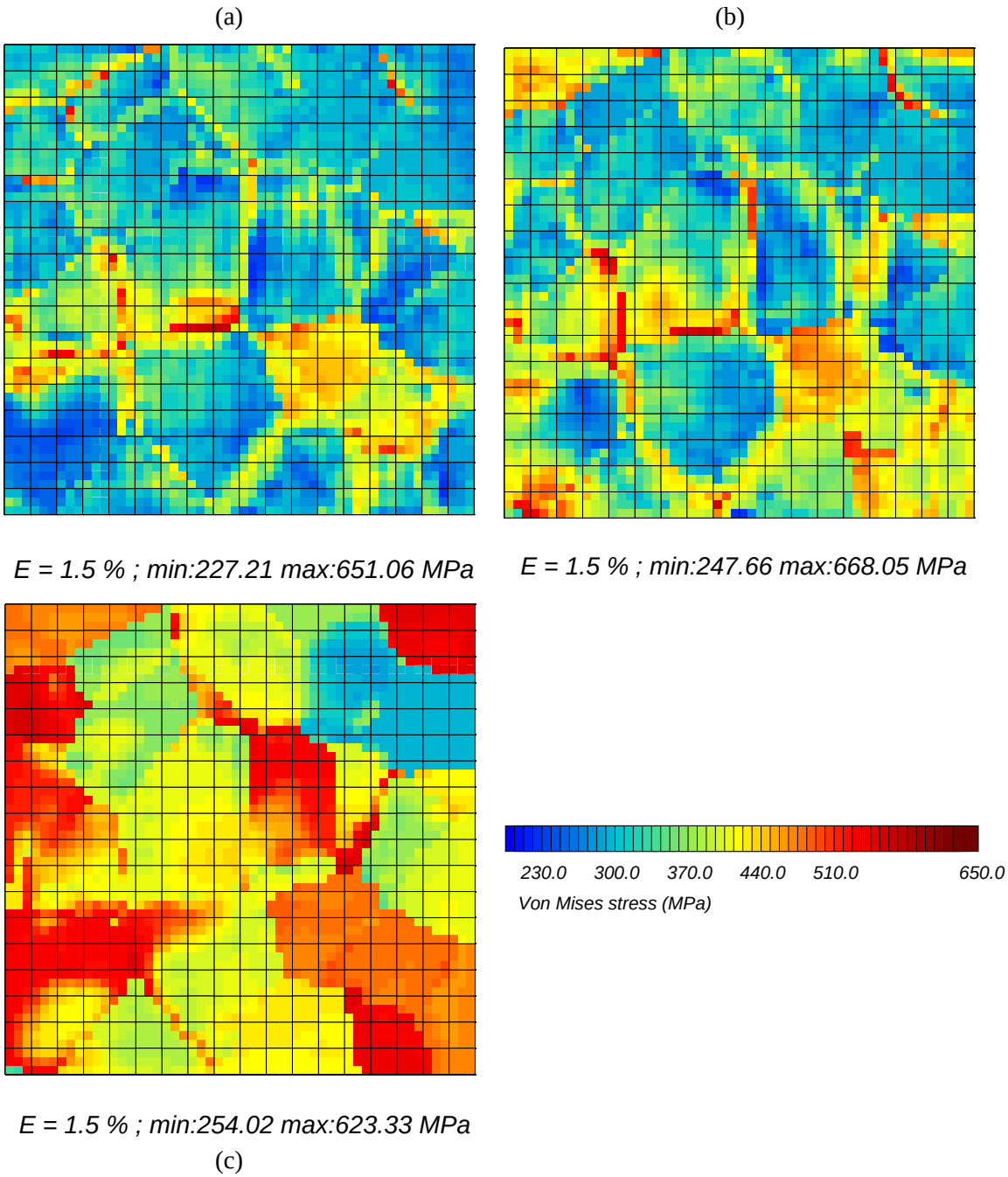


Figure III.13 : Contour of the von Mises stress on a lateral face of the polycrystal subjected to the conditions (a) 4FF, (b) MB, (c) HSB. Fig. III.8d shows the corresponding grain map

the effect of a *softened free surface*: in a polycrystalline aggregate with a free surface, the plastic deformations develop more freely. This corresponds to the case when dislocations simply vanish as they reach the surface, instead of dividing into two halves of a dipole, one which leaves the surface, the other which remains thus increasing the dislocation density [Ungár et al., 1998].

III.5 Conclusion

Finite element computations of a synthetic polycrystal are performed, using large finite element meshes to represent a significant number of grains with a significant number of Gauss points, and crystallographic viscoplastic laws. It has been observed that the mechanical response is successfully captured by a self–consistent approach, at least for the global stress–strain curve, and the averaged values for each phase: the agreement is very good and relatively independent of the applied boundary conditions, so that the presented aggregates are not far from being Representative Volume Elements. We obtain however 6% to 10% variation on the overall axial stress level. A systematic study on the estimation of the typical size of a RVE for a polycrystalline material is in progress, it may also be related to an intrinsic length scale of the material. In the constitutive modeling of single crystals used in this work, no intrinsic length scale can be introduced, so that no absolute size effect can be accounted for. Moreover, relative size effects regarding the ratio between grain size and the size of the cube play a major role in the definition of a RVE. Current work focuses on the introduction of generalised plasticity models [Forest, 1998] in order to introduce an absolute scale for the aggregate and describe grain size effects.

On the other hand, the major quantitative result deals with the local heterogenity, which is not taken into account by the models involving average fields. Variations of $\pm 100\%$ can be found on quantities like the axial stress component averaged in one grain due to the action of the real neighborhood. These variations are still bigger if local stress/strain contours are considered. Inside each grain, dramatic redistributions related to the plastic flow can lead to cumbersome stress states, with local axial compression under global tension load. Surprisingly, plastic deformation structures develop at a larger scale than the grain, showing that self–organisation phenomena related to neighborhood effects play a major role: the areas of intense plastic slip are clearly connected neither with a given crystallographic orientation nor with a given position with regards to surface, but it is the result of the joint effect of several grains.

Collecting data concerning these various intragranular stress/strain states will allow us to revisit damage development in polycrystalline materials. The present work already enables us to characterise the surface effect: by taking the case of homogeneous strain as a reference, it can be shown that for a free surface, the axial stress is lower, and the plastic strain is larger, even if the total amount of plastic slip is lower. Since the constraints are lower at the surface, the plasticity development is freer, and each slip system is more efficient, a lower number of slip systems being active. These results confirm other numerical attempts to characterise the softening in the vicinity of the surface [Pilvin, 1998, Sauzay et Gilormini, 1999]. Nevertheless, the effects due to the neighborhood of a grain are more significant than the surface effect. The present paper tries to bring a new element in the discussion by pointing out the well-known fact that the classical models of an inclusion embedded in a homogeneous medium do not capture the intragranular effect, and underestimate the real heterogenity in the material.

——————————— fin de l'article 2 *Int J Plasticity* ———————————

nb de grains	10	10	10	10	40	40	100	200	1000
désignation	10a	10b	10c	10d	40a	40b	100	200	1000
norme (%)	87.8	89.0	91.1	86.1	90.3	95.0	92.7	95.2	100

Tableau III.2 : Contraintes axiales normées de polycristaux de cuivre élastoplastiques pour une déformation axiale $\varepsilon = 0.002$ (la figure III.14 présente les courbes de traction correspondant à cette mesure). Les contraintes sont normées par rapport à la contrainte axiale obtenue avec le polycristal à 1000 grains

III.6 Complément de résultats à l'échelle macroscopique

III.6.1 Détermination du VER de polycristal isotrope en terme de nombre de grains

Une condition pour pouvoir attribuer à un milieu hétérogène aléatoire les propriétés effectives d'un milieu continu est que ce milieu respecte l'hypothèse d'ergodicité exposée dans les travaux de Kröner [Kröner, 1980]. Cette hypothèse, pour être respectée, impose que la moyenne stochastique portant sur l'espace de diverses mesures en des points aléatoires d'un volume représentatif soit égale à la mesure moyenne sur ce volume total. Il est aussi montré par Sab [Sab, 1992] que les propriétés globales d'un domaine suffisamment grand dans un milieu ergodique aléatoire sont déterministes. Ainsi, dans un milieu constitué de polyèdres de Voronoï générés à partir d'une distribution poissonienne de points, il existe bien un nombre suffisant de cellules à partir duquel la réponse moyenne du milieu est obtenue. C'est ce que nous avons pu vérifier au travers d'essais de traction simple *(i)* sur des polycristaux de zinc en élasticité et *(ii)* sur des polycristaux de cuivre en élastoviscoplasticité contenant de 10 à 1000 grains.
Une telle étude de convergence multi-échelle a été menée par Terada et ses co-auteurs avec des approches en homogénéisation pour des milieux bidimensionnels à matrice et inclusions circulaires [Terada et al., 2000]. La convergence est bien atteinte avec des domaines suffisamment grands, pour des cas de sollicitation équivalents : conditions périodiques, conditions en déplacement, conditions mixtes de traction simple. Une convergence en terme de nombre de grains a aussi été atteinte dans l'étude par éléments finis de la transition du multi- au poly-cristal de Quilici, Forest et Cailletaud [Quilici et al., 1998]. Nous avons par ailleurs exposé dans le chapitre 2, section II.5.3, les résultats de T. Kanit concernant la réponse macroscopique d'un milieu biphasé représenté avec des polyèdres de Voronoï ; les réponses de plusieurs réalisations convergent bien si on augmente le nombre de grains et elles convergent vers la réponse d'un modèle autocohérent [Kanit, 2000].

a) Milieu élastique hétérogène

Comme on le remarque en section II.5.7, figure II.18a, une différence de comportement effectif existe entre un polycristal à 200 grains et un polycristal à 1000 grains mais cette différence est de l'ordre de 1%. On peut donc retenir que, pour un matériau à élasticité isotrope transverse dont le rapport maximum entre deux modules d'élasticité est de l'ordre de 5, 200 grains fourniront des caractéristiques effectives significatives. Dans le cas présent, ce rapport de 5 est obtenu avec les modules d'élasticité C_{1111} et C_{1122}.
Pour l'analyse de l'influence du nombre de grains sur la réponse effective d'un polycristal en élastoplasticité, nous nous intéressons aux réponses de polycristaux de cuivre dont les courbes effectives sont reproduites dans la figure III.14. Nous avons reporté dans le tableau III.2 les con-

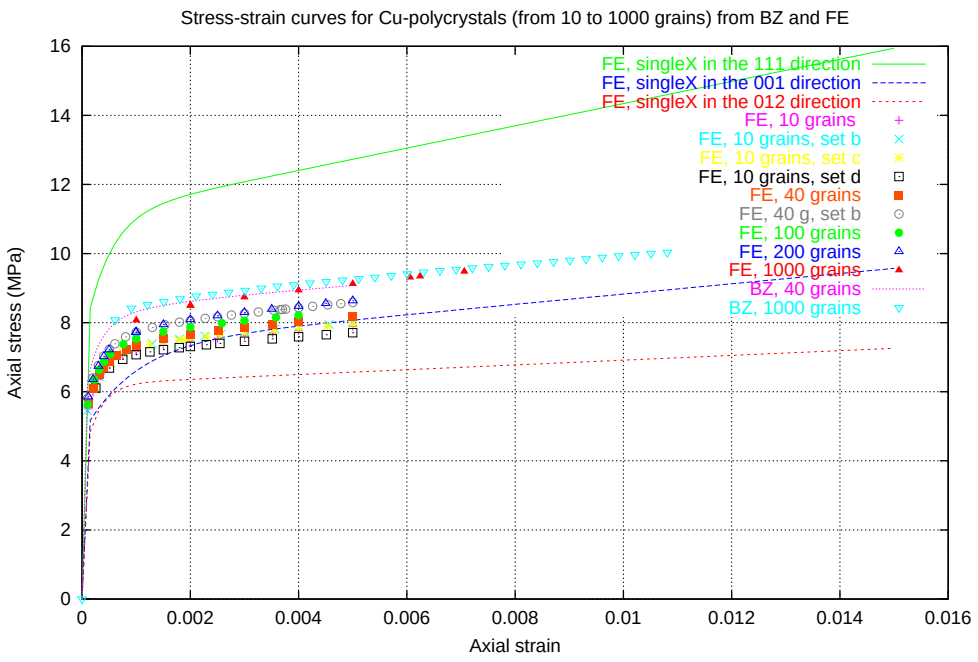


Figure III.14 : Courbes de traction effectives de multicristaux de cuivre élastoviscoplastique avec un nombre variable de grains (de 10 à 1000)

traintes axiales normées de polycristaux pour $\varepsilon = 0.002$, c'est à dire les réponses au 'sortir' du domaine élastique. Le cuivre étudié est à élasticité cubique ; le rapport maximum entre deux modules d'élasticité est 2, soit un rapport deux fois plus petit que celui du zinc. Malgré un moindre contraste de propriétés élastiques, le comportement du cuivre, dès qu'il devient plastique, s'avère beaucoup plus sensible au nombre de grains du polycristal que celui du zinc en élasticité : la différence en contrainte axiale atteint 5% entre 200 et 1000 grains alors que l'écart ne dépasse pas 1% pour le zinc en élasticité. Nous retenons donc que la détermination du nombre minimum de grains à faire paraître dans un polycristal pour avoir un VER n'aboutira pas aux mêmes résultats en élasticité et en élastoplasticité. En outre, cette determination reste propre à tel ou tel matériau : si 200 grains suffisent pour de l'INCO600, ce n'est pas le cas pour du cuivre ou du zinc.

b) Polycristal élastoviscoplastique (cuivre)

Les courbes de la figure III.14 présentent *(i)* les réponses par EF de plusieurs agrégats de cuivre contenant de 10 à 1000 grains, *(ii)* la réponse d'un polycristal à 40 grains et d'un autre à 1000 grains obtenue par homogénéisation avec la règle de transition BZ et *(iii)* les réponses de monocristaux dont l'axe de traction est orienté respectivement suivant le vecteur (001), (111) et (012), exprimé dans le repère matériau. Il y a bien convergence de la réponse effective des polycristaux EF vers la réponse, et du polycristal EF à 1000 grains, et du polycristal homogénéisé. Cette réponse est comprise entre la réponse du monocristal le plus dur (111) et celle du plus mou (012). On remarque que la réponse effective du VER (qui est aussi celle du polycristal à 1000 grains) ne s'obtient pas directement en moyennant les réponses des multicristaux à 10 grains ou à 40 grains. Pourtant la réponse du monocristal (111) montre qu'il existe bien un monocristal dont la réponse est plus dure que celle du polycristal à 1000 grains. Il n'y a donc pas assez de réalisations de microstructures pour vérifier l'hypothèse d'ergodicité.

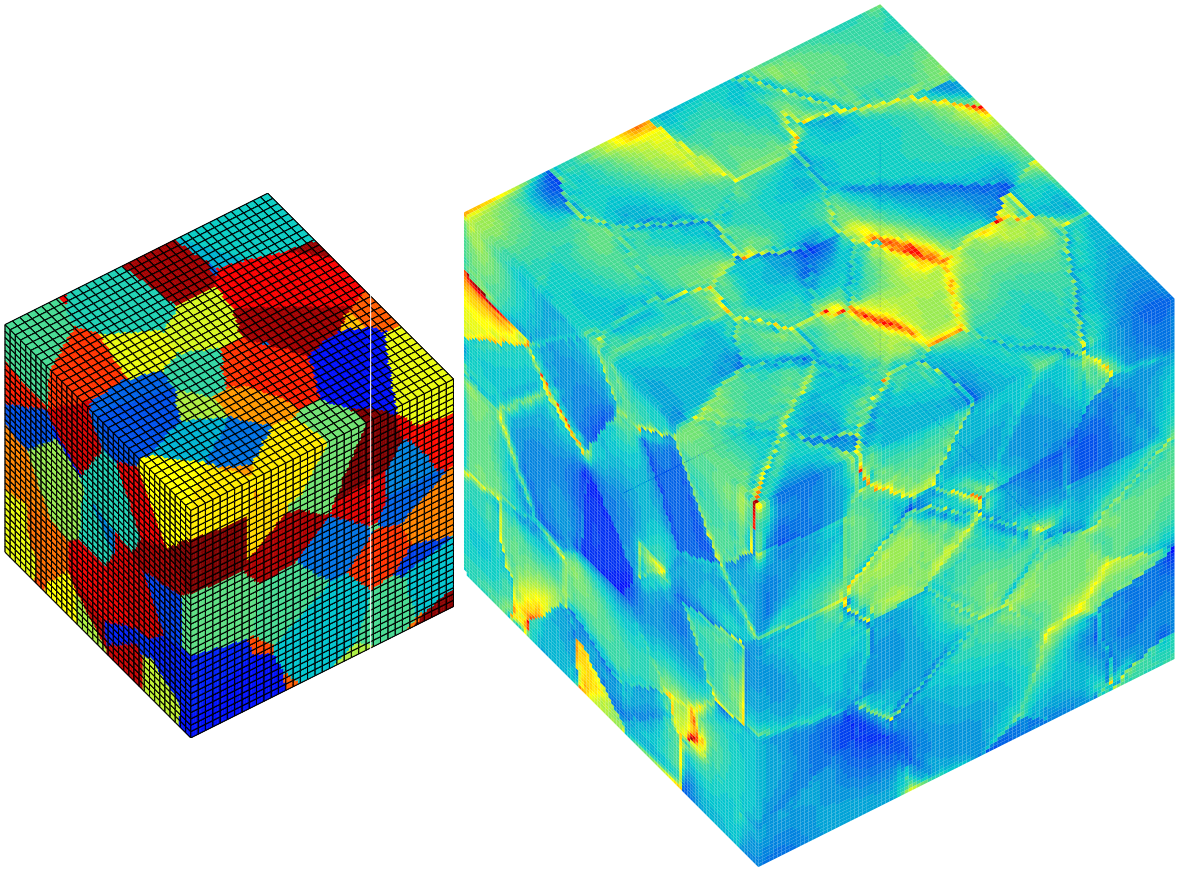


Figure III.15 : (droite) Distribution de la contrainte équivalente de von Mises sur la surface d'un agrégat de zinc élastique (gauche) soumis à un chargement mixte en traction isovolumique

III.6.2 Comportement élastoviscoplastique moyen d'un polycristal à élasticité hétérogène en chargement hydrostatique

a) Intérêt de ce cas d'étude

Dans les approches macroscopiques de la plasticité des métaux, le seuil de plasticité est généralement obtenu à partir du critère de von Mises associé à l'hypothèse de normalité de l'écoulement plastique. La loi d'écoulement plastique ne prend alors en compte que la partie déviatorique du tenseur des contraintes. Donc si le matériau est soumis à une pression hydrostatique, sa déformation reste élastique vu que les termes hors-diagonale du tenseur des contraintes sont nuls. De même, le matériau est supposé conserver son volume au cours d'une déformation plastique. Cette caractéristique est observée expérimentalement pour la plupart des tests en traction et compression uniaxiale. Mais, comme le signalent Brünig et ses co-auteurs [Brünig et al., 2000], d'autres expériences sur l'aluminium et sur aciers ont montré que la contrainte d'écoulement était approximativement proportionnelle à la pression hydrostatique. C'est pourquoi certaines théories emploient des critères d'écoulement généralisés basés tant sur I_1 (termes hydrostatiques) que sur J_2 (termes déviatoriques). D'après Brünig *et al*, la prise en compte des termes hydrostatiques a un effet significatif sur la prédiction de l'amorçage de la localisation des déformations et par suite sur les modes de déformation, ce qui correspond aux observations expérimentales citées dans leur

article.
En décrivant le comportement d'un polycristal tout en tenant compte des hétérogénéités qui le composent, nous pouvons mettre à défaut l'hypothèse de normalité de l'écoulement. Pour ceci il est possible, par exemple, d'imposer un chargement hydrostatique à un polycristal dont l'élasticité est hétérogène. Les champs de contrainte non-uniformes induits par l'élasticité produiront alors des chargements locaux non-hydrostatiques, à l'origine d'un écoulement plastique local qui résultera en un comportement effectif non-élastique.

b) Résultat préliminaire : le zinc en élasticité

Afin, tout d'abord, de mettre en évidence l'hétérogénéité de comportement en élasticité, nous présentons sur la figure III.15 les champs de contrainte équivalente de von Mises à la surface d'un agrégat de zinc en élasticité. Il s'agit d'un polycristal à 200 grains (*m4*) chargé en traction isovolumique. Les conditions de sollicitations sont mixtes en déplacement, telles que les déformations puissent être libres dans les plans des faces extérieurs de la structure : on impose uniquement des déplacements normaux aux faces du cube dont l'amplitude préserve le volume. On a donc appliqué U_z sur les faces normales à l'axe z de traction et $-U_z/2$ sur les faces parallèles à l'axe de traction.
Le zinc ayant une élasticité isotrope transverse dont le rapport maximum entre deux modules vaut de l'ordre de 5, il produit une forte hétérogénéité en élasticité, telle que nous l'observons sur la figure III.15 : les valeurs de la contrainte de von Mises sont comprises entre 170 et 1200MPa, soit un écart relatif de l'ordre de 120% par rapport à la valeur moyenne (440MPa). Les grandes valeurs sont atteintes surtout au voisinage proche des joints de grain mais il ne s'agit pas d'un effet de la discrétisation spatiale en éléments multiphasés. Effectivement on retrouve ces contraintes élevées localisées le long des joints de grains dans des calculs de multicristaux de zinc où les joints de grains sont décrits par des frontières d'éléments [Parisot et al., 2001]. Cette tendance au confinement des fortes contraintes le long des joints de grain observée avec du zinc en élasticité s'explique par le fait que le comportement est marqué d'une forte anisotropie entre la direction de l'axe d'isotropie transverse et une direction orthogonale à cet axe : la réponse est 2.7 fois plus raide dans le plan basal que dans la direction de l'axe c ; l'équilibre des contraintes prend donc place majoritairement dans une même direction sur une courte distance, sans induire de contrainte dans la direction duale. Notons que même si l'on s'abstient de considérer les zones de localisation d'une épaisseur inférieure à deux points d'intégration sur la figure III.15, il subsiste des zones fortement hétérogènes. Rappelons enfin que cette modélisation fait figurer un très grand nombre de points d'intégration ($18 \times 18 \times 18$ points par grain) par rapport à nos modélisations précédentes et que c'est dans ces conditions que l'on s'approche le plus d'une description numériquement convergée. Considérant par ailleurs que l'intervalle de contraintes couvert par les couleurs de la figure est très étendu -de 200 à 1100MPa pour 50 couleurs-, nous pouvons bel et bien justifier d'un caractère très hétérogène pour le zinc en élasticité.

c) Résultat en chargement hydrostatique

Cette hétérogénéité de comportement élastique se traduit, en chargement global hydrostatique, par des chargements locaux non-hydrostatiques responsables du déclenchement de glissements plastiques. Nous avons choisi d'illustrer ce fait par une simulation de traction hydrostatique suivi d'une compression hydrostatique. Ainsi nous pouvons obtenir la déformation permanente à contrainte nulle, induite par les chargements locaux. Les courbes sont données sur la figure III.16a,b. Le calcul n'a pas pu se prolonger jusqu'à la contrainte nulle aussi ne connaîtrons-nous la valeur de

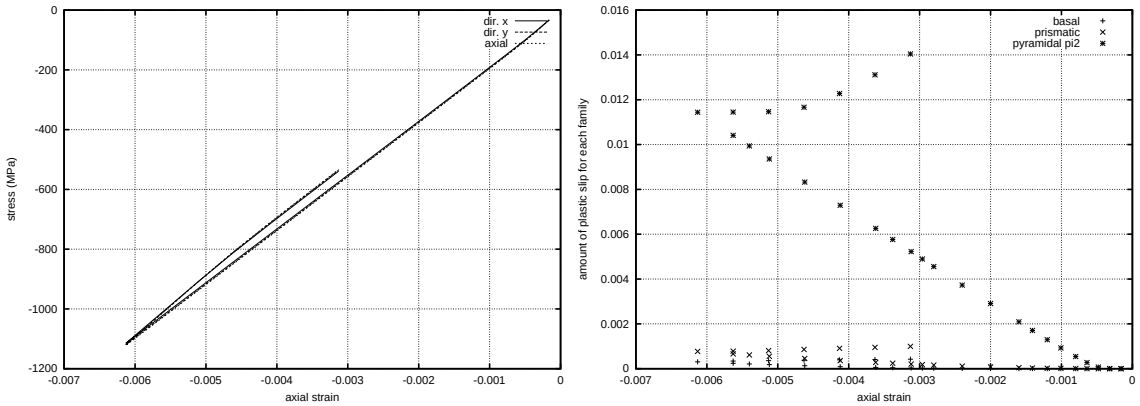


Figure III.16 : Courbes effectives d'un polycristal de zinc élastoplastique en chargement hydrostatique alterné (charge, décharge) : (gauche) contraintes, (droite) somme sur les systèmes des glissements cumulés, pour les trois familles

la déformation correspondante que par extrapolation. Nous trouvons ainsi, à déformation nulle à la décharge, un décalage en contrainte de l'ordre de 40 MPa, soit environ un cinquième de la contrainte seuil initiale $\sigma_y/5$. Ceci correspond à l'écrouissage induit par le comportement hétérogène élastique, écrouissage qui serait resté nul si nous avions, ou supposé l'élasticité isotrope, ou utilisé une loi macroscopique respectant l'hypothèse de normalité de l'écoulement.

Sur la figure III.16b est représentée la quantité de glissement cumulé pour chaque famille de glissement -basal, prismatique, pyramidal π_2. Cette quantité correspond à la somme des glissements cumulés sur tous les systèmes ($\sum_s |\gamma^s|$). La famille de glissements la plus active est celle des pyramidaux π_2, comme cela a été observé expérimentalement [Parisot et al., 2001]. Pour ce cas de chargement hydrostatique, les glissements pyramidaux π_2 sont les plus actifs car ils prennent place majoritairement au voisinage d'un joint de grain [Barbe et al., 2001d, Parisot et al., 2001] et c'est précisément en ces zones que sont générés les hétérogénéités de déformations élastiques (voir figure III.15). Nous remarquons par ailleurs que l'intervalle de déformation élastique est plus de deux fois plus grand au cours de la décharge qu'au cours de la charge. Ceci est une autre manisfestation des réarrangements internes au matériau résultant de l'écrouissage local : les conditions de sollicitation en chaque point ont varié entre la charge et la décharge de telle sorte que les déformations élastiques sont moins hétérogènes après qu'avant la charge en compression ; les déformations viscoplastiques ont permis d'équilibrer partiellement les contraintes internes issues du chargement élastique.

Dans cette section nous avons considéré un cas de simulation pour lequel une approche classique de la viscoplasticité ne prévoit pas d'écrouissage. Comme avec un modèle d'homogénéisation prenant en compte le comportement moyen de chaque grain d'un polycristal, nous avons mis à défaut l'approche macroscopique en montrant que les contraintes internes issues du chargement élastique provoquaient le déclenchement de glissements et que ces glissements résultaient en une déformation permanente non négligeable par rapport à la contrainte seuil. Il conviendrait maintenant de pratiquer le même test hydrostatique avec plusieurs approches afin de quantifier l'effet de l'élasticité hétérogène sur la déviation par rapport à une loi classique et par rapport à un modèle à champ moyen.

III.7 Complément de résultats à l'échelle intragranulaire

III.7.1 Traversées de microstructure

En complément de la figure III.12, les figures III.17a,b montrent l'évolution de la déformation et de la contrainte axiales pour 4 temps de chargement, le long d'une ligne de points de Gauss traversant l'agrégat *m4* à 200 grains de part en part. Nous imposons au cristal le cas de chargement *HSB* présenté en section III.2 : les conditions limites sont homogènes en déformation sur le contour de la structure et correspondent à la réponse du polycristal en traction simple à 1.5%, calculée par homogénéisation avec la règle de transition de Berveiller-Zaoui. La structure comprend $28 \times 28 \times 28$ éléments (chacun ayant un volume égal à 1) alors que la figure III.12 est issue d'une structure à $18 \times 18 \times 18$ éléments. C'est pourquoi les variables sont moins dispersées d'un point à l'autre d'un même grain. Outre la réponse locale EF, nous avons reporté la réponse moyenne de chaque grain traversé et le réponse de ces mêmes grains d'après le calcul d'homogénéisation présenté en section III.2. L'accord des réponses effectives par grain entre le calcul EF et l'homogénéisation est satisfaisant qualitativement et reste acceptable quantitativement, la plus grande différence - de l'ordre de 20%- étant obtenue en déformation. Il n'est pas possible de dire, sur la base de ces figures, si le modèle d'homogénéisation sur-estime ou sous-estime les contraintes : pour la moitié des grains traversés, la contrainte de l'homogénéisation est la plus grande. Dans de récents travaux [Barbe et al., 2001c], nous avons effectué une analyse approfondie sur la base d'une telle traversée de microstructure. Il s'avère que ni le volume d'un grain ni son orientation ne semblent être des éléments primordiaux pour obtenir un bon accord entre le calcul EF et l'homogénéisation ; c'est le voisinage tout entier d'un grain qui influencera le plus son comportement moyen, même pour les plus gros grains.

Localement, la contrainte évolue par petits sursauts, même au sein d'un même élément. Ceci est dù à la pression hydrostatique à l'intérieur des éléments, qui affecte les termes de la diagonale du tenseur des contraintes. Il est possible de s'affranchir de cet effet en soustrayant à chaque composante de la diagonale le tiers de la trace des contraintes et en ajoutant le tiers de la trace moyennée sur l'élément ($\sigma'_{ii} = \sigma_{ii} - \sigma_{kk}3 + 13\sum_{pg}\sigma^{pg}_{kk}27$). Mais dans le cas d'éléments multi-phasés, il serait incongru de relier le comportement en un point d'intégration à celui de l'élément entier car le comportement d'un point d'un grain voisin risquerait d'être pris en compte. Une autre manière simple de s'affranchir de cet effet est de considérer la contrainte équivalente de von Mises. Toutefois, comme nous le voyons dans [Barbe et al., 2001c], cet effet de pression hydrostatique est significativement atténué avec le raffinement du maillage ; il devient presque négligeable par rapport aux variations d'un grain à un autre.

A propos de l'interprétation des figures III.17a,b, nous vérifions que l'hétérogénéité de déformation grandit beaucoup plus au cours du chargement que l'hétérogénéité de contrainte. Ceci est dû à l'adoucissement progressif de l'écrouissage au cours du chargement : pour une faible variation relative de contrainte, la variation relative de déformation devient de plus en plus importante. En pratique, alors que les contraintes deviennent presque homogènes à l'intérieur des grains avec des variations brutales au voisinage d'un joint de grain, les déformations apparaissent nettement variables tant entre grains qu'à l'intérieur des grains [Barbe et al., 2001c].

Il est difficile de faire d'autres interprétations sur la base de ces figures car elles ne concernent que quelques grains et ne reportent pas d'informations sur le volume du grain traversé (différent du nombre de points apparaissant sur la figure car l'intersection de la ligne de mesure avec les grains est indépendante de la taille des grains). Ceci a été vu dans [Barbe et al., 2001c]. Nous

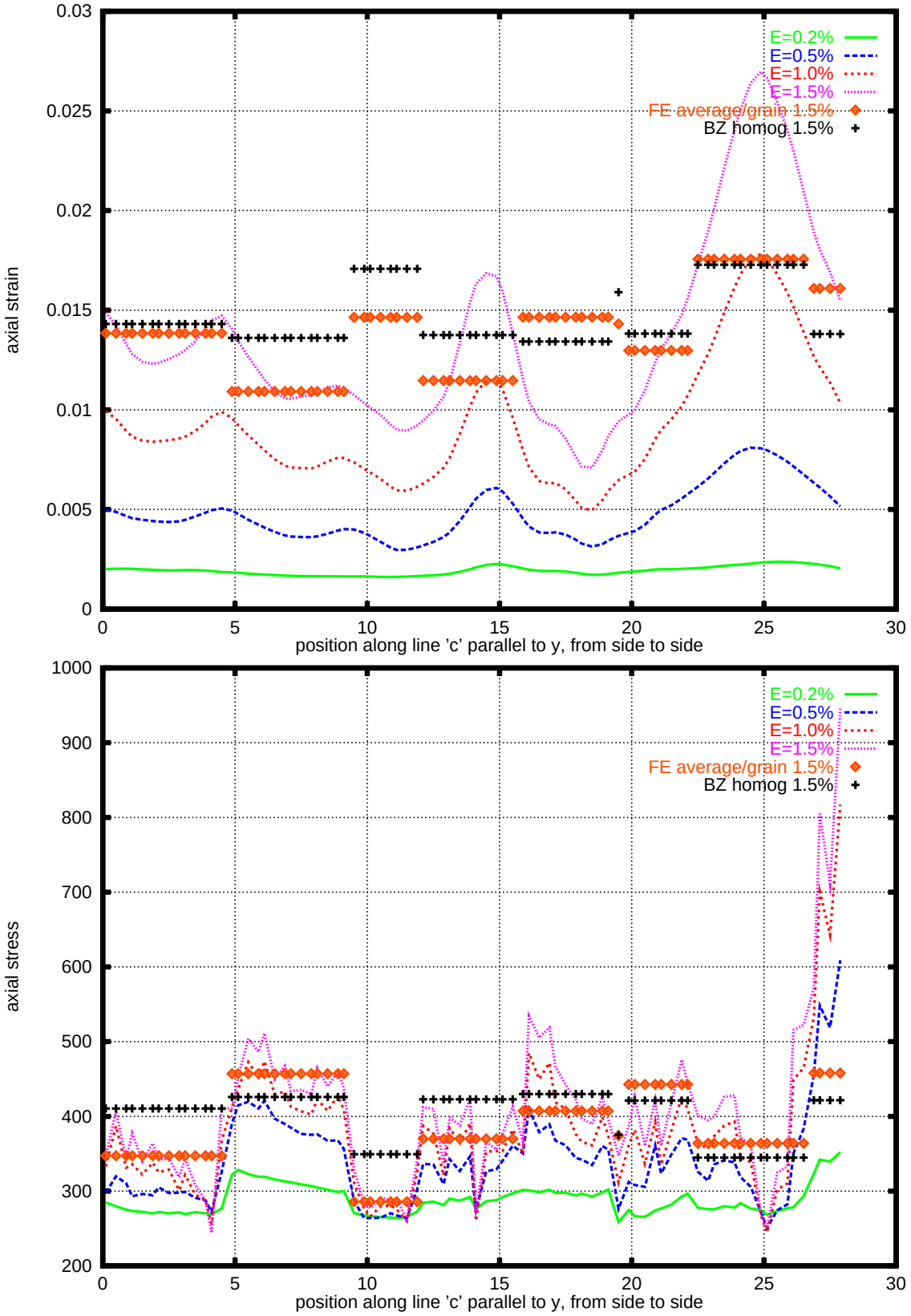


Figure III.17 : Evolution de la déformation (haut) et de la contrainte axiale (bas) le long d'une ligne traversant l'agrégat m4 (200 grains), par EF (28^3 éléments) et par homogénéisation

retenons simplement que l'hétérogénéité est très marquée à l'intérieur des grains et que les joints de grains semblent être le lieu de fortes variations. Afin de voir si les joints ont une influence qui puisse caractériser le comportement intragranulaire, nous abordons dans la suite une étude systématique du comportement local en fonction de la distance au joint de grain, pour un grain particulier (*grain58*, le plus gros) mais surtout pour tous les grains.

III.7.2 Comportement en fonction de la distance au joint de grain

Le comportement local peut être analysé en fonction de la distance au joint de grain afin de qualifier et quantifier l'effet du joint de grain. On peut s'attendre à ce que les variables de contrainte révèlent un renforcement près des joints de grain du fait des conditions multiples de sollicitation induits par les grains voisins. L'hétérogénéité aux abords d'un joint de grain devrait être d'autant plus marquée que, comme nous l'avons vu, l'interaction entre grains est un caractère prépondérant du comportement moyen de chaque grain. L'analyse qui suit est effectuée sur la base des mêmes résultats que dans la section précédente, *i.e.* pour l'agrégat *m4* à 200 grains sollicité en traction avec des conditions de déformation homogène au contour (HSB). La structure EF correspondante contient 28^3 éléments, chacun ayant un volume égal à 1.

a) Détermination de la distance au joint de grain

Pour déterminer la distance au joint de chaque point d'un grain, nous avons d'abord défini l'ensemble des points du grain qui constituent le joint de grain. Ce sont les points situés le long du contour extérieur du grain, définis de la manière suivante :

(i) les points des plans $(z = z_{min})$ et $(z = z_{max})$,

(ii) dans chaque plan $(z = z_i)$ (où z_i désigne la hauteur de chaque plan i de points d'intégration entre z_{min} et z_{max}) et sur chaque ligne $(y = y^i_j)$ (où y^i_j désigne l'ordonnée de chaque ligne j du plan z_i), les points d'abcisse $(x = x^{ij}_{min})$ et $(x = x^{ij}_{max})$

(iii) dans chaque plan $(z = z_i)$ et sur chaque ligne $(x = x^i_k)$ (où x^i_k désigne l'abscisse de chaque ligne k du plan z_i), les points d'ordonnée $(y = y^{ik}_{min})$ et $(y = y^{ik}_{max})$

Ainsi retrouvons-nous ces points définissant le joint de grain à la distance $d = 0$ sur les figures ; ces points appartiennent au grain, nous le rappelons.

b) Etude dans un grain particulier

La figure III.18a,b présente la distribution de la déformation axiale et de la contrainte axiale en chacun des points du grain le plus gros (*grain58*) de l'agrégat *m4* en fonction de la distance au joint de grain.

L'hétérogénéité apparaît beaucoup plus prononcée près du grain qu'au milieu mais l'intervalle de déformation [resp. contrainte] couvert par les points à une distance donnée du joint ne semble se décaler ni vers le haut ni vers le bas à l'approche du joint. Nous en avons pour preuve la réponse moyenne obtenue par intervalles de distances au joint (taille 0.1 et 0.3) : pour chaque point dont la distance au joint est comprise entre 0 et 0.1 [resp. 0 et 0.3], on calcule la moyenne et on passe à l'intervalle suivant, en s'éloignant du bord. On constate que cette réponse moyenne de tous les points situés à la même distance du joint n'évolue pas pour la contrainte et évolue légèrement pour la déformation. Cette même analyse dans d'autres grains conduit à des observations variées : la réponse par intervalles de distances peut augmenter comme diminuer à l'approche d'un grain, en déformation comme en contrainte. Les seules caractéristiques communes à tous les grains concernent *(i)* la variation relative de la réponse entre le bord et le centre –elle est toujours plus forte en déformation qu'en contrainte, comme nous le remarquions en section III.7.1– et *(ii)* la

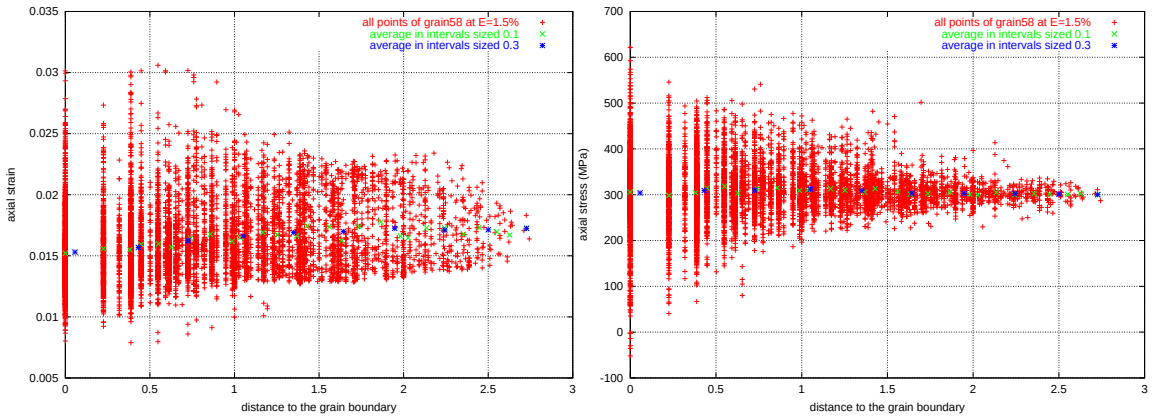


Figure III.18 : Réponse locale en chacun des points de *grain58* (le plus gros de la microstructure à 200 grains *m4*) en fonction de la distance au joint de grain ; (gauche) déformation axiale, (droite) contrainte axiale

dispersion des réponses pour une même distance au joint –elle évolue doucement entre le bord et le centre en déformation et très rapidement en contrainte.

c) Etude sur tous les grains

Remarque : pour cette partie de l'analyse, la déformation axiale globale vaut 0.75%, non pas 1.5% comme dans les sections précédentes car nous ne disposions pas du résultat à 1.5% pour toutes les variables.

Afin de déterminer s'il y a un effet du joint de grain qui se manifeste en moyenne sur l'ensemble des grains, nous avons procédé à un dépouillement de chaque grain, similaire à celui présenté précédemment, puis nous avons moyenné les réponses par intervalles de distances sur tous les grains de l'agrégat. Ceci constitue donc une caractérisation de l'influence moyenne des joints de grains dans un polycristal. Les résultats sont reportés sur les figures III.19a,b,c,d,e,f. L'échelle de distance au joint de grain n'a pas été modifiée d'un grain à l'autre : le centre d'un grain de diamêtre maximum égal à 2 (*i.e.* 2 éléments) est situé à la distance $d = 1$ sur la courbe ; le centre d'un grain de diamêtre maximum égal à 5 (*i.e.* 5 éléments) est situé à la distance $d = 2.5$. Sachant que le diamêtre moyen d'un grain est 4.8, nous devons nous limiter aux distances au joints de grains d inférieures à 2 pour toucher suffisamment de grains et mener une analyse significative d'un comportement moyen. Les distances d supérieures à 2 ne concernent que les plus gros grains.

Nous présentons d'abord la contrainte équivalente de von Mises, la déformation équivalente cumulée, la somme des glissements cumulés et la somme des valeurs absolues des cissions résolues (fig. III.19a,b,c,d). Pour une distance d inférieure à 1.5, nous observons une évolution presque continue des moyennes, en particulier pour la taille d'intervalle la plus petite (0.01). Au delà de cette distance, les moyennes par intervalle de taille 0.01 sont plus dispersées du fait qu'elles ne portent que sur un nombre limité de valeurs. Du fait de l'aspect continu de l'évolution en deça de $d = 1.5$, nous disposons dans cette zone de valeurs correctes pour une analyse représentative de la majorité des grains : aucun grain n'affecte la réponse moyenne à lui seul.

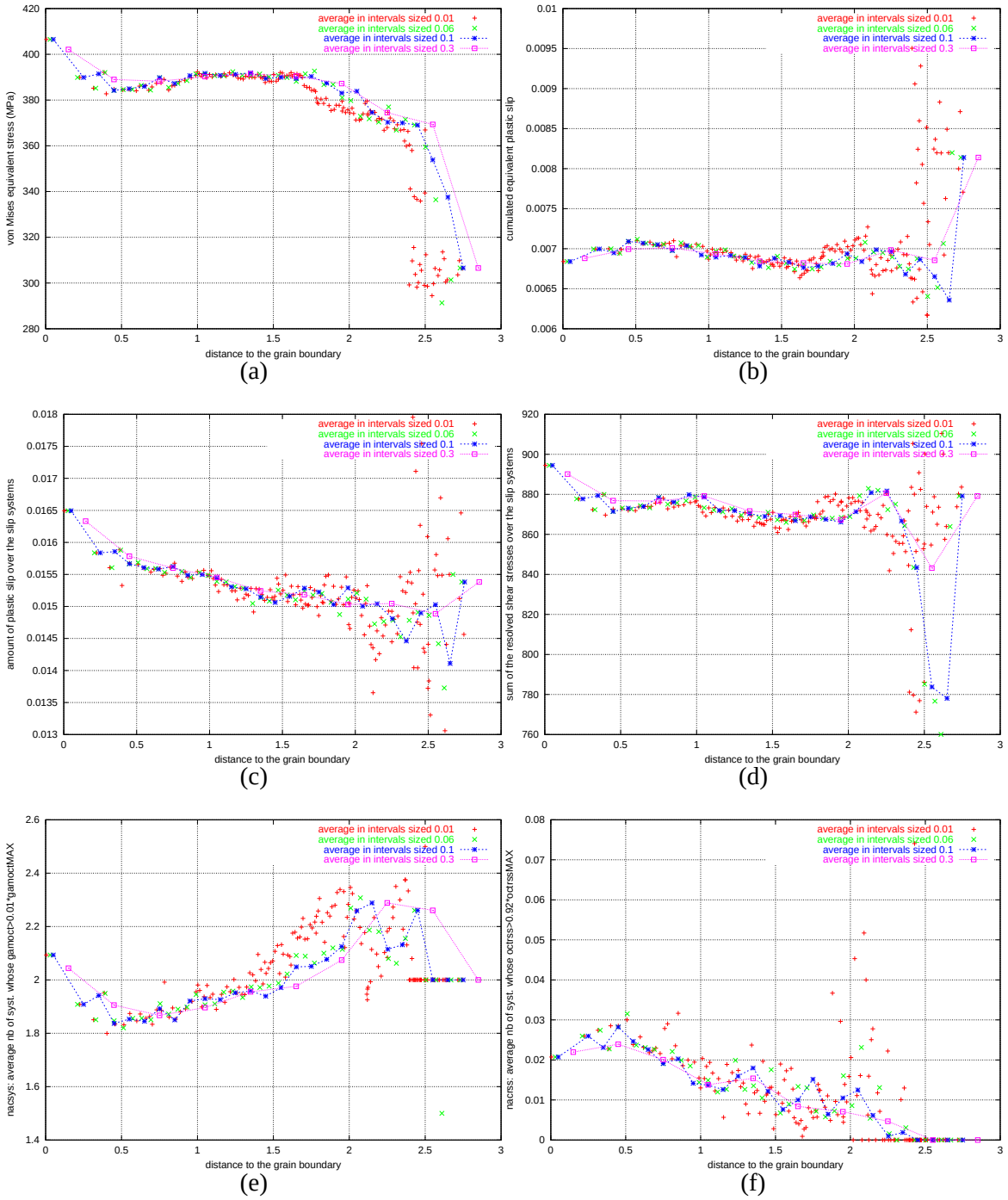


Figure III.19 : Variables moyennées dans des intervalles de distances au joint de grain (de taille 0.01, 0.06, 0.1, 0.3) en fonction de la distance au joint de grain ; ces variables sont en outre moyennées sur l'ensemble des grains ; (a) contrainte équivalente de von Mises, (b) déformation plastique équivalente cumulée, (c) somme des glissements cumulés, (d) somme des cissions résolues, (e) nombre de systèmes dont le glissement excède 0.1% du glissement maximum, (f) nombre de systèmes dont la cission résolue excède 92% de la cission résolue maximum

Analyse près du joint moyen

Dans la zone comprise entre $(d = 0)$ et $(d = 1.5)$, nous observons une variation très près du joint pour la contrainte équivalente, la somme des glissements et la somme des cissions (fig. III.19a,b,c). Ces trois variables sont toutes distinctement plus élevées le long du joint de grain, comparativement aux valeurs à $d = 0.5$. La différence peut paraître faible mais elle est significative dans le sens où elle est issue d'une moyenne sur 200 grains. A l'inverse de ces trois variables, la déformation équivalente apparait légerement plus faible près du joint (fig. III.19d). Nous observons donc le même effet que celui de l'étude de l'effet de surface (section III.4.2, fig. III.11 : le comportement au voisinage d'un joint subit un léger gradient de signe opposé à celui au voisinage d'une surface libre. Autrement dit, joint de grain ou conditions homogènes en déformation, l'effet est le même, avec un état de contraintes plus élevées, une quantité de glissement et de cissions résolues plus élevés, et moins de déformation.

En complément de ces variables, entre $d = 0$ et $d = 0.5$, le nombre de systèmes dont le glissement a dépassé 1% du glissement maximum subit une décroissance alors que le nombre de systèmes dont la cission résolue a dépassé 92% de la cission résolue maximum tend a croître (fig. III.19e,f). Il peut y avoir deux raisons pour que ces nombres soient plus élevés : ou le nombre de systèmes actifs est plus élevé (le nombre de systèmes pour lesquels la cission résolue critique est dépassée est plus élevé), ou les valeurs des glissements [resp. cissions résolues] activés sont plus proches de la valeur maximum (cas d'une distribution plus homogène des valeurs maximales). Cette deuxième raison semble être appropriée pour expliquer la décroissance à l'abord du joint : se réferant aux courbes de fig. III.11e,f de l'effet de surface libre, nous constatons que le maximum de glissement est atteint dans le cas d'une surface libre et que le nombre de systèmes ayant dépassé une valeur *absolue* de glissement est moindre près d'une surface libre ; le joint de grain ayant un effet inverse, il favorise l'activation de plus de systèmes qu'au cœur du grain mais limite le glissement du système le plus propice au glissement, le rendant plus proche des autres systèmes activés. Concernant les cissions résolues nous ne pouvons dire quel est l'effet prédominant, faute d'avoir des informations sur les maximums des cissions atteintes et sur le nombre de cissions ayant dépassé un seuil absolu. C'est un travail en cours, présenté lors de la soutenance, qui faira l'objet d'une communication.

Analyse au cœur des gros grains

C'est au milieu des gros grains que le matériau est le moins contraint. C'est effectivement là que la contrainte équivalente est la moins élevée alors que la déformation plastique cumulée y est la plus élevée (fig. III.19a,b). C'est aussi au cœur de ces gros grains que la somme des glissements et la somme des cissions résolues y sont le moins élevés (fig. III.19c,d). Cette configuration de déformation correspond à l'activation de 2 ou 3 systèmes dont les glissements ne sont bloqués ni par d'autres glissements, ni par un joint de grain, ni par des conditions de déformation au contour. Sur les figures III.19e,f on constate que le nombre de glissements actifs est plus homogène au centre des gros grains qu'ailleurs, avec 3 systèmes actifs, glissement maximum compris. On retrouve cette homogénéité sur la figure III.20 présentant la distribution du nombre de systèmes dont le glissement a atteint 10% du glissement maximum. Cette distribution est homogène pour la plupart des grains avec 2 systèmes prépondérants. En plus des points de joint triple, les points du contour peuvent être le siège d'activation du plus grand nombre de systèmes (jusqu'à 7 systèmes dont le glissement vaut au moins 10% du glissement maximum). Cette analyse est cohérente avec l'analyse de l'effet de surface : les zones où la déformation plastique équivalente (cumulée ou non) est la moins élevée alors que la contrainte équivalente y est plus élevée que la moyenne cor-

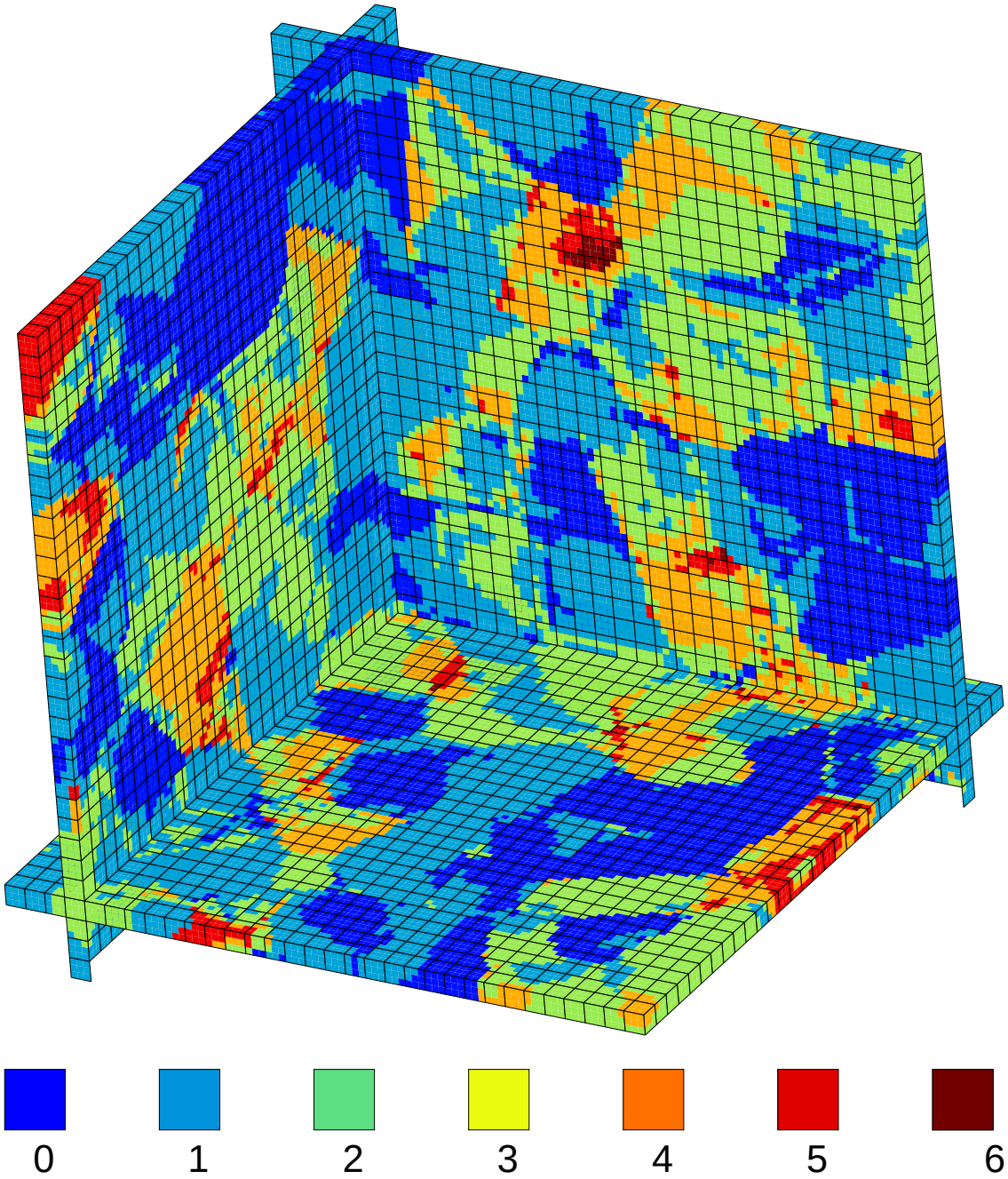


Figure III.20 : Distribution du nombre de systèmes dont le glissement a dépassé 10% du glissement maximum sur des tranches d'éléments *à l'intérieur* du polycristal *m4* à 200 grains

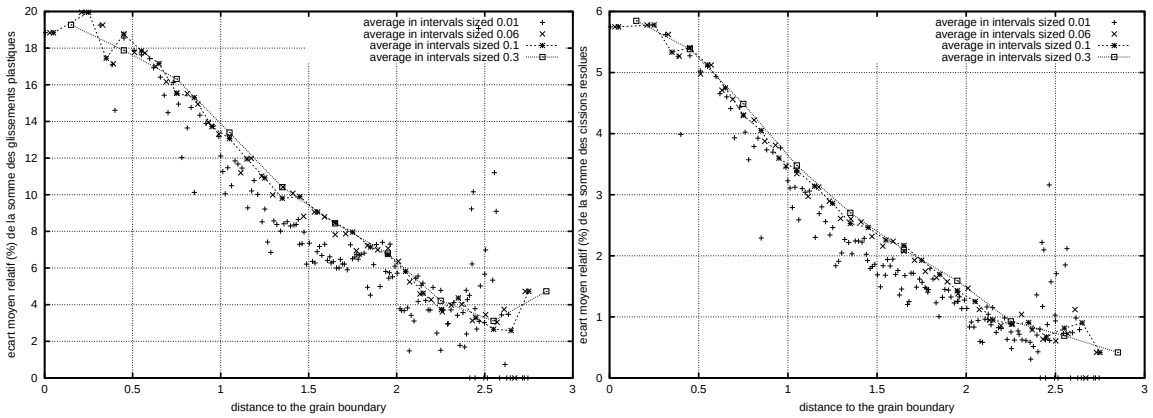


Figure III.21 : Ecart Moyen Relatif en moyenne dans des intervalles de distances au joint de grain (de taille 0.01, 0.06, 0.1, 0.3) en fonction de la distance au joint de grain ; ces variables sont aussi moyennées sur l'ensemble des grains ; (gauche) écart moyen pour la somme des glissements, (droite) écart moyen pour la somme des cissions résolues

respondent à des zones contraintes par un joint de grain ou des conditions limites au contour. Le nombre de systèmes actifs ainsi que la somme des glissements y sont supérieurs à la moyenne mais les valeurs maximales des glissements y sont inférieures.

Analyse de dispersion

Comme nous le remarquons avec les figures III.18a,b, la dispersion du comportement est plus prononcée près d'un joint de grain qu'en son centre et ceci n'est pas exclusivement dû au fait qu'il y a moins de points au centre qu'au bord car la dispersion n'est pas la même avec la déformation qu'avec la contrainte. Nous avons donc calculé l'écart moyen relatif pour chaque distance moyenne au joint (*i.e.* pour des intervalles de distances de $0.01, 0.06, 0.1, 0.3$). Cet Ecart Moyen Relatif est défini par la relation $E.M.R. = 1/ < x > \sum_{i=1}^{N} |x_i - < x > |/N$ où N est le nombre de points dans l'intervalle considéré, $< x >$ la valeur moyenne sur tous les points de l'intervalle ($< x >= \sum_{i=1}^{N} x_i$) et x_i la valeur au point i. Cet écart a été mesuré pour la somme des cissions résolues et pour la somme des glissements. Le résultat obtenu est prévisible : l'écart diminue constamment depuis le joint de grain jusqu'au centre, avec à peu près la même pente relative que le nombre de points en fonction de la distance au joint de grain (figure III.22). Mais la valeur de cet écart est 4 fois plus élevée pour la quantité de glissement que pour la quantité de cission résolue. Cela s'explique par la forme d'une courbe de traction en élastoplasticité : une fois que le domaine plastique est atteint, une grande variation de déformation produit une petite variation de contrainte, à l'inverse de ce qui se produit en élasticité. Reste à déterminer comment évolue cet écart moyen au cours du chargement, s'il augmente continuement dès qu'une hétérogénéité de comportement apparaît ou s'il atteint une valeur proche de son maximum au début de l'écrouissage.

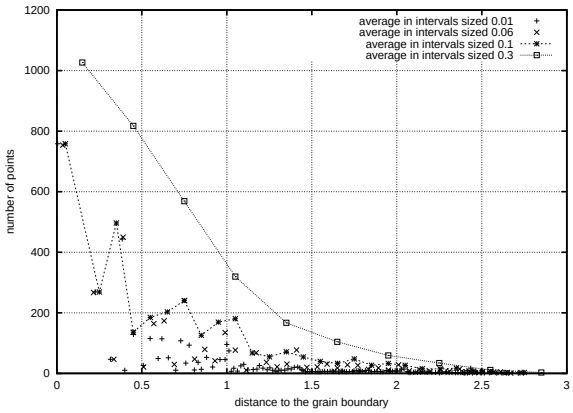


Figure III.22 : Nombre *moyen* de points dans chaque intervalle de distance au joint de grain, pour des intervalles de taille 0.01, 0.06, 0.1, 0.3, en fonction de la distance au joint de grain

III.8 Résumé des résultats

Dans ce chapitre nous avons présenté tout d'abord les résultats d'analyse d'un polycristal particulier à 200 grains. Nous avons vu au chapitre précédent que pour ce nombre de grains et pour l'INCO600, la contrainte axiale varie de moins de 5% entre différentes réalisations de microstructures à 200 grains avec des orientations aléatoires. Nous avons donc adopté un tel polycristal pour l'analyse de l'effet des conditions limites et obtenu une différence effective de 7% entre le cas de sollicitation à déformation homogène au contour et le cas à faces latérales libres. Au sens de l'insensibilité à la microstructure, ce polycristal pouvait donc paraître satisfaisant pour une représentation d'un volume élémentaire de polycristal, mais il s'avère être moins représentatif au sens de l'insensibilité aux conditions limites.

De l'analyse de l'effet des conditions limites, nous retenons qu'une surface libre favorise la dispersion des déformations moyennes par grain et des déformations locales. Avec des conditions homogènes en déformation, ce sont les contraintes dont la dispersion est favorisée et la contrainte effective est plus élevé qu'avec des surfaces libres. Nous retrouvons le cas expérimental d'une surface libre 'adoucie'. L'étude du *comportement intragranulaire moyen* nous a fournit des résultats cohérents avec ceux de l'effet des conditions limites : dans un état très contraint -au bord de la structure soumise à des déformations ou au voisinage proche d'un joint de grain-, les contraintes sont plus élevées, il y a plus de glissements activés mais ces glissements atteignent des valeurs moindres que dans un cas de sollicitation relaché.

A titre d'application de la méthodologie générale, nous donnons en outre l'exemple d'un agrégat de zinc élastoviscoplastique sollicité hydrostatiquement. Après décharge, nous obtenons une déformation permanente (extrapolée) non négligeable qui révèle la non validité des modèles phénoménologiques ne prenant en compte que les composantes hors-diagonale du tenseyr des contraintes.

Chapitre -IV-

Etude en cours, perspectives

Sommaire

IV.1 Evolutions récentes des capacités de résolution numérique 77

IV.2 Etude de l'effet de taille de grain 79

IV.2.1 Relation de Petch, empilement et énergie de faute d'empilement . . . 79

IV.2.2 Alternatives à la proportionnalité en $1/d^{1/2}$ 81

IV.2.3 Récapitulatif de résultats 82

Ce chapitre présente les bases pour des travaux en cours ou en perspective : tout d'abord nous revenons sur les méthodes de résolution numérique implémentées dans le code de calcul ZéBuLoN et sur leurs évolutions récentes. Des capacités offertes pour tous les calculs présentés dans ce document aux capacités permises dès à présent, la différence est significative : il est maintenant possible de modéliser des structures deux à trois fois plus grosses pour des ressources numériques équivalentes. Ensuite nous dressons une revue bibliographique de l'étude de l'effet de taille de grain, que nous avons vainement tenté de rendre exhaustive. A partir de cette revue, nous pouvons pleinement prendre conscience de la complexité de l'effet et de l'intérêt qui subsiste, malgré de nombreuses études, à aborder ce sujet par modélisation.

IV.1 Evolutions récentes des capacités de résolution numérique

Les applications du code de calcul ZéBuLoN sur des machines parallèles ne se limitent pas à celles présentées dans l'article [Barbe et al., 2001a]. Toute structure contenant un grand nombre de degrés de liberté peut être traitée par une décomposition en sous-domaines. Si la matrice du système est convenablement préconditionnée, les propriétés de convergence de FETI sont relativement insensibles à la taille du problème interface et au nombre de sous-domaines [Fahrat et Roux, 1994]. C'est pourquoi, pourvu que l'on dispose de suffisamment de processeurs, on pourra toujours espérer traiter un gros problème de structure, presque sans affecter le temps de calcul. Seules les ressources en mémoire augmentent avec la taille du problème. Ceci est vérifié pour la plupart

des problèmes en chargement élastique. Mais ce n'est pas le cas pour le traitement de problèmes non-linéaires fortement hétérogènes : le problème posé sur une même structure décomposée en 28 sous-domaines réguliers ou en 56 sous-domaines réguliers converge dans le premier cas et diverge dans le second.

Pour Feyel et Quilici [Feyel, 1998, Quilici et Cailletaud, 1997, Quilici et Cailletaud, 1999] (principaux développeurs du calcul parallèle dans le code ZéBuLoN), l'objectif est de pouvoir recourir au traitement parallèle de n'importe quelle structure sans que ceci nécessite plus de prétraitement qu'un calcul séquentiel. Donc le code doit être transportable, *i.e.* compilable et implémentable sur toutes les architectures de calcul existantes, que ce soit une machine à mémoire partagée (tous les processeurs de la machine parallèle accèdent à la même mémoire), ou une une machine à mémoire distribuée (chaque processeur dispose de sa propre mémoire, comme un cluster de PCs, un IBM-SP2), ou encore une mémoire distribuée partageable (SGI-Origin2000). Cette condition de transportabilité est maintenant remplie depuis deux ans. Il est de plus possible et parfois intéressant de traiter un problème en plusieurs sous-domaines sur le même processeur séquentiel.

Une autre condition à remplir pour respecter cet objectif est de s'assurer que le problème puisse bien converger quand il est décomposé en sous-domaines. Comme nous l'avons constaté au cours des tests de convergence pour diverses décompositions, cette condition n'est pas facile à respecter pour des problèmes hétérogènes non-linéaires. Effectivement la résolution à l'interface des sous-domaines se fait par une méthode itérative, la solution est donc approchée. Cette approximation peut conduire à un décalage irréversible entre la solution exacte et la solution approchée, décalage qui se répercute d'un incrément de chargement à l'autre si bien que la précision de convergence de la méthode itérative peut ne plus être atteinte lors d'un chargement en plusieurs incréments. Pour traiter de telles difficultés on peut être amené à diminuer le nombre de sous-domaines, tout en attribuant la charge de travail maximale à chaque processeur : c'est alors la mémoire des processeurs qui détermine la taille des sous-domaines et donc leur nombre. Ces problèmes devraient être progressivement résolus par l'amélioration des préconditionneurs.

Cette restriction liée à un découpage maximum admissible est aujourd'hui en passe d'être remplacée par d'autres restrictions liées au post-traitement des problèmes. L'utilisation de méthodes itératives ou directs associée à un stockage creux des matrices pour la résolution des systèmes linéaires sur chaque sous-domaine permet effectivement pour l'heure de diviser par trois la mémoire requise (le stockage est dit *creux* dans le sens où seuls les termes non nuls sont stockés : pour un cube 3D d'éléments à 8 nœuds on peut compter 1 terme non nul sur 1000 pour 50000 degrés de liberté, le stockage creux ne requiert alors que 5% de la mémoire occupée par un stockage *ligne de ciel* [Baranger, 1995]). Et il est concevable de diviser cette mémoire par dix avec l'algorithme multifrontal de factorisation des matrices creuses (DSCPACK) issu des travaux de Gupta, Karypis et Kumar [Gupta et al., 1997]. Ainsi un problème que nous traitions en 1999 et début 2000 sur 28 processeurs disposant de 256 Mo chacun peut actuellement être traité sur un seul processeur à 1 Go. Comme les machines parallèles évoluent elles aussi vers une augmentation des ressources mémoire (surtout les clusters de PCs), il est maintenant pratiquement possible de traiter des problèmes dont la taille des sous-domaines correspond à la taille de la structure globale, avec les méthodes de résolution précédentes. Les possibilités de traitement sont donc considérablement accrues tant et si bien que la taille maximum des structures traitables n'est plus limitée par le calcul mais par la mémoire requise pour le dépouillement.

Les perspectives du calcul parallèle avec découpage de la structure en sous-domaines restent

donc très ouvertes. Parmi d'autres perspectives, notons le développement de la méthode FE^2 par Feyel [Feyel, 1998, Feyel et Chaboche, 2000], dans la poursuite de ses recherches d'application de calculs à très grand nombre de degré de liberté. Cette méthode permet de modéliser le comportement de structures quasi-périodiques par des calculs à deux échelles de modélisation : l'échelle globale décomposée en sous-domaines et l'échelle des sous-domaines, eux-mêmes décomposés en cellules périodiques décrites par des éléments finis. La réponse de la structure globale est donc déterminée par l'assemblage des réponses des éléments finis dans chaque cellule suivi de l'assemblage par homogénéisation périodique des cellules dans chaque sous-domaine , suivi de l'assemblage des sous-domaines (par la méthode itérative FETI). Pour ce type de calcul à deux échelles, le calcul est parallélisé tant entre différents processeurs d'une machine parallèle qu'au sein d'un même processeur. On peut aussi attribuer à chaque point de Gauss d'une structure EF la réponse d'un VER déterminée par homogénéisation périodique. C'est ce qui est fait dans les travaux présentés par Bourgeois *et al* [Bourgeois et al., 1999]. Cette méthode, très gourmande en ressources numériques comme celle de Feyel, est permise grâce à la contribution du calcul parallèle. Une telle approche serait imaginable dans le cas de matériaux aléatoires en utilisant nos calculs de VER en chaque point de Gauss dans des zones critiques de la structure.

IV.2 Etude de l'effet de taille de grain

Une première étude de l'effet de la taille de grains sur des polycristaux a été menée sur de petits polycristaux, en calcul séquentiel. La cinématique du milieu et le modèle de comportement correspondent à un milieu de Cosserat, faisant intervenir une longueur caractéristique de la microstructure. Il s'agit donc d'un modèle où la dépendance à la taille de grain n'est pas introduite explicitement dans les lois de comportement mais résulte, au niveau macroscopique, du caractère non local du modèle. Cette première étude, associée à la présentation du modèle utilisé, fait l'objet de l'article publié en septembre 2000 dans (*Int J Solids Structures*, vol. 37-47, pp 7105-7126), reporté en annexe [Forest et al., 2000].
Cette étude de l'effet de taille de grain, qui s'est traduite par une relation en $1/d^{1/2}$ de la contrainte seuil, doit être étendue à d'autres matériaux et à des polycristaux contenant plus de grains, afin de s'assurer de la reproductibilité de cette relation. Nous devons par ailleurs recueillir des références bibliographiques concernant ces études afin de connaître les effets observés expérimentalement. La suite de ce paragraphe est consacrée à une revue des travaux reportant des mesures expérimentales de l'effet de la taille de grain sur la contrainte seuil (ou la contrainte d'écoulement), et à quelques résultats de modélisation de cet effet.

IV.2.1 Relation de Petch, empilement et énergie de faute d'empilement

La relation de Petch propose de relier la contrainte seuil à la taille de grain par $\sigma_y = \sigma_0 + k/d^{1/2}$ où d est la taille de grain, σ_0 la contrainte de friction, k le facteur de Hall-Petch [Petch, 1953]. Cette équation est basée sur la théorie d'empilement de dislocations du même signe générée par une source de Frank-Read : plus un grain est grand, plus les mouvements de dislocations seront libérés de l'influence des joints de grain et plus les possibilités d'empilement seront nombreuses (plus grande diversité des tailles et des positions des empilements), d'où une contrainte d'écrouissage moins élévée. Cette théorie est issue des travaux de Eshelby, Frank et Nabarro qui ont calculé la contrainte de cisaillement résultant de l'empilement d'un même type de dislocations contre un obstacle. Petch a utilisé cette théorie pour expliquer que la concentration de contrainte s'opérant

dans les plans denses de dislocations produit une résistance à la propagation des bandes de glissement proportionnelle à $1/d^{1/2}$. Pour cela, il a posé comme hypothèse restrictive que la longueur d'un empilement de dislocations du même signe est égale au rayon du grain. Sur cette même base, les travaux de Armstrong *et al* [Armstrong et al., 1962] ont étendu la relation de Petch au cas de la contrainte d'écoulement. Mais l'explication de la relation à partir de la théorie d'empilement n'a pas fait l'unanimité car ces empilements n'étaient pas observés directement (depuis des empilements ont été observés, par exemple dans un bicristal d'aluminium [Sun et al., 2000]). Li [Li, 1963] propose donc une théorie alternative pour les cas où les empilements ne sont pas observés, où les dislocations sont issues des joints de grain et retrouve la relation de Petch. Dans le modèle de Ashby basé sur l'accommodation des incompatibilités de déformation par la génération de dislocations géométriquement nécessaires, la relation reliant la contrainte d'écrouissage à la taille de grain est aussi de type Petch. Les récentes observations de Sun *et al* sur des bicristaux d'aluminium $99,9999\%$ concernant la formation et l'empilement de dislocations ne leur ont pas permis de déterminer si les joints de grains agissent comme des sources de dislocations ou comme inhibiteurs (absorbeurs). Ceci dépend effectivement des caractères du joint de grain. Néanmoins ils ont pu observer le développement de dislocations géométriquement nécessaires près des joints de grains, pour accommoder l'anisotropie de déformation élastique lors des premieres manifestations microscopiques de plasticité (*microyielding*). Ces constatations appuient le modèle de Ashby.

Armstrong a effectué une revue des effets de taille de grain sur les propriétés mécaniques [Armstrong, 1970]. Selon lui, la proportionnalité de la contrainte à $1/d^{1/2}$ s'observe pour la contrainte seuil mais aussi pour la contrainte de rupture ductile, la contrainte de rupture fragile, la contrainte d'écoulement, la dureté, la limite de fatigue et la contrainte seuil en fatigue. Les résultats expérimentaux en fatigue cyclique sont assez controversés : Thompson et Backofen ne reportent aucun effet de taille sur la durée de vie en fatigue (à amplitude de contrainte constante) du cuivre et de l'aluminium [Thompson et Backofen, 1971]. Plus récemment, dans la revue effectuée par Petit et Mendez [Petit et Mendez, 1996], les auteurs reportent des résultats très sensibles à la taille moyenne des grains pour du cuivre, tant en fatigue à grand nombre de cycles qu'à faible nombre de cycles. L'effet observé sur la contrainte seuil en cyclique correspond à la relation de Petch. D'après les mesures effectuées par Gotte *et al*, la réduction nette de durée de vie d'un polycristal de cuivre liée à l'augmentation de la taille moyenne des grains s'explique essentiellement par la cinétique de propagation de fissure [Gotte et al., 1996] : au cours d'un chargement en fatigue, l'initiation de l'endommagement n'occupe qu'une petite partie du nombre total de cycles ; donc, (certes) plus un grain est gros plus les fissures qui s'y forment sont grandes, mais la cause principale de la réduction de durée de vie est liée à une propagation plus rapide dans les gros grains.

Concernant le laiton-α, à l'inverse de leurs résultats sur le cuivre et l'aluminium, Thompson et Backofen observent bien un effet. La différence vient du fait que dans le laiton-α, il y a très peu de glissement transverse et pas de formation de sous-structures de grain comme dans le cuivre et l'aluminium. Le modèle de Johnston et Feltner ne va pas dans le sens de cette constatation [Johnston et Feltner, 1970] : le renforcement de la contrainte dû aux joints de grains est déterminé en fonction des modes de glissement et de la densité de dislocations. Les matériaux les plus sensibles sont donc ceux dont l'anisotropie de comportement plastique est la plus prononcée et, par opposition, les moins sensibles sont ceux qui ont le plus de caractère isotrope (métaux cfc à haute énergie de faute d'empilement, métaux cc). Les travaux [Thompson et Backofen, 1971, Thompson et al., 1973, Thompson et Baskes, 1973] sur l'aluminum, le cuivre et le laiton qui présentent respectivement une énergie de faute d'empilement décroissante ont bien révélé une influence croissante de la taille de grain. Meakin et Petch [Meakin et Petch, 1974] confirment l'importance de l'énergie de

faute d'empilement dans leurs mesures expérimentales sur du laiton à haute teneur en zinc (basse énergie) et du laiton à faible teneur en zinc (plus haute énergie). Dans le premier, du fait de la faible énergie de faute d'empilement, les dislocations sont confinées contre les joints de grain dans des plans parallèles, conformément au modèle d'empilement des dislocations. Dans le second, la formation de cellules intragranulaires empêche le développement de tels empilements et les effets de taille de grain deviennent négligeables au cours de la déformation. Il y a donc bien une corrélation entre l'énergie de faute d'empilement et la sensibilité du comportement d'un matériau à la taille de grain. Ceci a aussi été montré par la considération des mécanismes de déformation à l'échelle atomique dans des nano-cristaux [van Swygenhoven et al., 1999] : les auteurs ont observé que des déformations intragranulaires prennent place dans les gros grains alors que la déformation est accommodée dans les joints de grains pour des grains plus petits ; la transition du mode de déformation intergranulaire à intragranulaire intervient à une taille de grain déterminée par l'énergie de faute d'empilement.

IV.2.2 Alternatives à la proportionnalité en $1/d^{1/2}$

Parmi les premiers modèles ne reproduisant pas une proportionnalité exclusivement en $1/d^{1/2}$, celui de Kocks montre, à partir de la modélisation d'un grain en composite biphasé dur/mou, que la contrainte devrait être proportionnelle à $1/d$ à toutes les déformations pour les polycristaux à petits grains ($d < 10\mu m$). Il remarque que les modèles reproduisant une proportionnalité en $1/d^{1/2}$ sont basés sur l'hypothèse que la longueur moyenne de glissement est égale au diamètre du grain. Mais cette cette distance moyenne n'excède jamais 10 à $100\mu m$ et, pour de tels diamètres, la courbe $y = 1/d^{1/2}$ tend à se confondre avec $y = cte = distance\ de\ glissement\ maxi$. La relation de Petch ne serait donc éventuellement valable que pour des diamètres intermédiaires, pas trop petits car alors σ est proportionnel à $1/d$, pas trop grands car alors les effets dus à la distance moyenne de glissement seraient prédominants [Kocks, 1970]. Thompson, Baskes et Flanagan [Thompson et al., 1973, Thompson et Baskes, 1973] ont fait intervenir directement cette distance moyenne de glissement dans une relation entre la contrainte moyenne d'écrouissage, la taille de grain et la distance de glissement : $\sigma = \sigma_0 + (1 - \lambda^s/d)(K_1/\lambda^s) + \lambda^s/d(K_2/d^{1/2})$ dans laquelle d le diamètre moyen, λ^s la distance moyenne de glissement, K_1, K_2 constants. Le terme en K_1 correspond à la contribution des dislocations statistiquement stockées, celui en K_2 à la contribution des dislocations géométriquement nécessaires. Cette relation permet de reproduire l'effet flagrant de taille observé sur du laiton 70-30, et les très légers effets observés sur du cuivre et de l'aluminium. Ces effets paraissent effectivement bien corrélés avec l'évolution de la distance moyenne de glissement au cours de la déformation mesurée pour ces métaux. L'aluminium et le cuivre ayant des énergies de faute d'empilement plus élevées que le laiton, des murs de dislocations se forment au cours de la déformation et tendent à faire rapidement baisser la distance moyenne de glissement (tant par la formation de nouveaux blocs cellulaires que par la réduction continue de la taille des cellules) jusqu'à sa valeur minimum (de 2 à $4\mu m$). La distance moyenne de glissement n'est plus dépendante de la taille de grain à 10% de déformation alors que pour le laiton, elle reste dépendante au delà de 30%. Thompson et ses co-auteurs déduisent de leur modèle un comportement moyen de type Petch pour le laiton ($d < 300\mu m, \varepsilon < 0.05$), pour le cuivre ($d < 100\mu m, \varepsilon < 0.01$), et pour l'aluminium ($d < 10\mu m, \varepsilon < 0.002$), où ε est l'offset de déformation pour la mesure de contrainte. Pour des déformations plus grandes, ou pour des diamètres plus petits, les prédictions de relation avec $1/d^{1/2}$ sont non-linéaires. Thompson revient sur ces observations expérimentales dans [Thompson, 1974] pour évaluer la validité du modèle de Ashby (conduisant à une proportionnalité en $1/d^{1/2}$) et conclut qu'il ne convient pas pour reproduire les mesures expérimentales sur le cuivre et le laiton, particulièrement pour $\varepsilon > 0.01$. On retrouve cette conclusion

dans les travaux de Tabata et ses co-auteurs sur les monocristaux d'aluminium sollicités selon la direction (111) [Tabata et al., 1982]. Ils déduisent de leurs observations que le parcours moyen d'une dislocation mobile est déterminé par la taille des blocs cellulaires, à savoir que la contrainte d'écoulement est proportionnelle à $1/d$ où d est la taille des cellules, et cette contrainte est proportionnelle à la densité de dislocations dans les frontières de cellules (*forest dislocation density in a cell wall*).

D'autres travaux prévoient une dépendence en $1/d$ ou simplement différente de $1/d^{1/2}$:
- Hirth annonce, sur la base de références de mesures expérimentales, une variation de la relation entre $1/d$ et $1/d^{1/3}$ [Hirth, 1972],
- dans l'équation phénoménologique de l'écrouissage des polycristaux de Yagushi et Margolin, la contrainte est proportionnelle a $1/d$ [Yaguchi et Margolin, 1981],
- Dollar et Gorczyca montrent que tant un exposant $-1/2$ que -1 peuvent permettre de décrire l'effet de taille de grain pour du fer [Dollar et Gorczyca, 1982],
- Meyers et Ashworth obtiennent alternativement une dépendence en $1/d$ et en $1/d^{1/2}$ en fonction de la relation choisie entre l'épaisseur de la bande d'écrouissage intergranulaire et la taille du grain [Meyers et Ashworth, 1982],
- Mecking fait part de son hésitation quant au choix entre $1/d$ et $1/d^{1/2}$ [Mecking, 1981],
- Jiang, Lian et Baudelet ont proposé un modèle basé sur la théorie d'empilement des dislocations et sur le développement de dislocations géométriquement nécessaires [Jiang et al., 1995]. Ils prévoient que la contrainte d'écoulement sera proportionnelle à $1/d$ quand la densité de dislocations statistiquement stockées prédomine *i.e.* pour des gros grains et proportionnelle à $1/d^{1/2}$ pour les petits grains où la densité de dislocations géométriquement nécessaires prédomine.
- une étude récente d'Acharya et Beaudoin sur la base du modèle à gradient de déformation de Acharya et Bassani [Acharya et Bassani, 2000] appliqué par éléments finis à un polycristal à 213 grains de nickel orientés aléatoirement a révélé une relation en $1/d$ pour la contrainte macroscopique d'écrouissage, avec $d \leq 100\mu m$ [Acharya et Beaudoin, 2000].

Il n'y a donc pas pour l'instant de certitude quant à la validité de telle ou telle relation de la contrainte d'écrouissage à la taille de grain. Tout du moins cette revue nous convainc que le comportement effectif est intimement lié au développement de structures de dislocations dans les grains : c'est effectivement la formation et le développement de ces structures intragranulaires qui conditionnent la longueur de parcours d'une dislocation et la longueur des empilements. Nous ne pouvons donc pas nous en tenir à cette revue, il faut compléter l'étude par des résultats de mesures expérimentales de caractéristiques de ces structures de dislocations : évolution de la taille des cellules de dislocations au cours d'une déformation, évolution des densités de dislocations dans les murs, à l'intérieur des cellules, évolution de la densité de forêts de dislocations, évolution de la désorientation dans un joint de grain ou un mur de dislocations ... Ainsi nous pourrons tenter de corréler ces mesures microstructurales avec les mesures macroscopiques, au travers d'une littérature variée et pas seulement en se référant aux travaux qui adoptent l'hypothèse qui nous arrange. Il serait par ailleurs utile pour notre compréhension de tenter d'unifier le vocabulaire sur les structures de dislocations, le consensus n'existant pas encore chez les différents auteurs.

IV.2.3 Récapitulatif de résultats

Le tableau IV.1 permet de se faire une idée sur la validité expérimentale de la relation de Petch. On donne pour chacun des travaux *(i)* le matériau, *(ii)* l'état de déformation pour lequel la contrainte est mesurée, *(iii)* la valeur de n l'exposant de d dans l'équation $\sigma = \sigma_0 + k/d^n$, *(iv)* le nombre de

diamètres différents (qui peut être inférieur au nombre d'éprouvettes testées), *(v)* l'intervalle de diamètres investigués.
Dans la colonne 'état', 'l.y.p.' désigne la déformation pour la plus petite contrainte seuil (*lower yield point*) ; 'u.y.p.' désigne la déformation pour la contrainte seuil supérieure, *i.e.* celle mesurée après une déformation certaine dans le domaine plastique (par exemple, la contrainte en fin de plateau). La donnée $0.002 - 0.2$ signifie que des mesures ont été faites entre $\varepsilon = 0.002$ et $\varepsilon = 0.2$.
Le cas $N(\sigma = cte)$ sur la ligne relative à [Thompson et Backofen, 1971] désigne le nombre de cycle à rupture pour une sollicitation à contrainte constante. La valeur $n = 0$ signifie qu'aucun effet de taille de grain n'a été observé. Le nombre de diamètres distincts investigués peut varier en fonction de l'appréciation de chacun sur les courbes, c'est pourquoi il est parfois donné sous la forme $5 - 10$ ce qui signifie que l'on a de l'ordre de 5 à 10 diamètres suffisamment distincts les des autres pour que l'effet soit significatif.
Un des cas les plus explicites de la non-validité de la relation de Petch a été obtenu par Mueller et Haessner [Mueller et Haessner, 1981] avec des polycristaux de zinc très texturés et une gamme étendue de tailles de grain (de 0.5 à $500\mu m$). A $\varepsilon = 0.01$ la relation de Petch se vérifie dans la direction de laminage mais pas du tout dans la direction transverse où n vaut 0.02 et k 1000 au lieu de 10. Cette différence s'atténue pour $\varepsilon = 0.3$.

référence	matériau	état	n	nb de d	intervalle de d
[Petch, 1953]	acier doux	l.y.p.	$1/2$	10	$2-10mm^{-1/2}$
	Fe$-\alpha$	l.y.p.	$1/2$	10	$2-10mm^{-1/2}$
[Hull, 1961]	Fe Si 3%	l.y.p.	$1/2$	4	$1-7mm^{-1/2}$
[Tjerkstra, 1961]	Fe$-\alpha$	l.y.p.	$1/2$	3	$20,130,400\mu m$
[Russel et al., 1961]	acier C 0.09%	l.y.p.	$1/2$	4	$10-30in^{-1/2}$
[Williams, 1961]	Cu	0.3)	0	4	$50,80,100,200\mu m$
[Brown et Lukens, 1961]	acier Armco	u.y.p.	$1/2$	4	$44,74,111,140\mu m$
[Armstrong et al., 1962]	Fe$-\alpha$	$y.p.-0.2$	$1/2$	5-10	$2-8mm^{-1/2}$
	Cu	l.y.p.	$1/2$	3	$2-7mm^{-1/2}$
	laiton70/30	$y.p.-0.2$	$1/2$	7	$3-15mm^{-1/2}$
	Al-3.5%Mg	l.y.p.	$1/2$	5	$4.5-8mm^{-1/2}$
	Al	0.05	$1/2$	5	$3-7mm^{-1/2}$
	acier suédois	y.p.	$1/2$	5	$0.5-7mm^{-1/2}$
	Zn	$y.p.-0.15$	$1/2$	9-12	$2.5-6mm^{-1/2}$
[Jones et Conrad, 1969]	Ti$-\alpha$ A70	l.y.p.	$1/2$	5	$0.8-18\mu m$
	Ti$-\alpha$ iodide	0.002	$1/2$	4	$1.1-28\mu m$
[Thompson et Backofen, 1971]	laiton$-\alpha$	$N(\sigma=cte)$	$1/2$	3	$3-10mm^{-1/2}$
	Cu	$N(\sigma=cte)$	0	2	$2-8mm^{-1/2}$
	Al	$N(\sigma=cte)$	0	2	$2-8mm^{-1/2}$
[Thompson et Baskes, 1973]	Cu	0.002	$1/2$	5	$2-18mm^{-1/2}$
[Meakin et Petch, 1974]	laiton 30at%Zn	$u.y.p.-0.2$	$1/2$	8	$4-15mm^{-1/2}$
[Thompson, 1975]	Ni	u.y.p.	$1/2$	5	$0-0.3\mu m^{-1/2}$
[Hansen, 1977]	Al 99.999	$0.002-0.2$	$1/2$	12-14	$35-1300\mu m$
	Al 99.5	$0.002-0.2$	0	4	$15-240\mu m$
[Lederich et al., 1978]	Ti	$0.002-0.2$	$1/2$	6	$6-100\mu m$
[Mueller et Haessner, 1981]	Zn DL	0.01	0.61	20	$0.5-500\mu m$
	Zn DL	0.3	0.44	20	$0.5-500\mu m$
	Zn DT	0.01	0.02	20	$0.5-500\mu m$
	Zn DT	0.3	0.14	20	$0.5-500\mu m$
[Wert, 1982]	Al-Mg-Zn-Cu	$0.002-0.08$	$1/2$	3	$4-9mm^{-1/2}$
	Al-Mg-Zn-Cu vieilli	$0.002-0.08$	0	3	$4-9mm^{-1/2}$
[Dollar et Gorczyca, 1982]	Fe 0.02% C	l.y.p.	$1/2,1$	statis	
	Fe 0.05% C	l.y.p.	$1/2,1$	statis	
[Hansen et Ralph, 1982]	Cu 99.999	$0.05-0.2$	$1/2$	10	$2-9mm^{-1/2}$
	Cu 99.999 -196^oC	$0.05-0.2$	$1/2$	8	$2-9mm^{-1/2}$
[Narutani et Takamura, 1991]	Ni 99.99%	$0.002-0.05$	$1/2$	10	$20-90\mu m$
[Turnbull et De Los Rios, 1995]	Al	$y.p.-0.03$	$1/2$	3	$21,40,135\mu m$
	Al-2.63Mg	$y.p.-0.05$	$1/2$	4	$22,36,108,236\mu m$
	Al-2.07Li	$y.p.-0.0125$	$1/2$	7	$160-420\mu m$
[Nagarjuna et al., 1996]	Cu-1.5wt%Ti	$0.002-0.3$	$1/2$	4	$70-180\mu m$
	Cu-2.7wt%Ti	$0.002-0.2$	$1/2$	4	$73-171\mu m$
	Cu-4.5wt%Ti	$0.002-0.2$	$1/2$	4	$75-153\mu m$
	Cu-5.4wt%Ti	$0.002-0.15$	$1/2$	4	$79-125\mu m$

Tableau IV.1 : Travaux et résultats sur l'effet de taille de grain

Chapitre -V-

Conclusion

Dans cette étude nous présentons les outils numériques pour la modélisation du comportement élastoviscoplastique de polycristaux : les lois de comportement élastoplastiques de monocristaux cfc, cc, hc sont connues et on sait les intégrer dans une phase d'un milieu homogène équivalent ou au point d'intégration d'un maillage depuis plus de dix ans. Une véritable avancée dans l'application de ces modèles a été possible grâce au développement du calcul EF en parallèle. Celui-ci permet maintenant d'effectuer des simulations sur des structures considérablement plus grosses ; de la simulation de monocristaux ou bicristaux 3D où figuraient quelques milliers de points d'intégration nous sommes passés, au début de cette étude, à des polycristaux 3D à 200 grains définis avec un millier de points par grain. Une autre contribution majeure pour ce travail a été le développement du générateur de microstructure et la mise en place d'une interface directe avec les structures du code EF. Ceci a permis une systématisation du calcul de polycristaux presque réels : les morphologies de grains sont celles d'un milieu aléatoire de polyèdres de Voronoï ; les seules véritables limitations pour la modélisation de la microstructure d'un élément de volume représentatif sont des limitations de l'ordre de la précision de discrétisation, elles sont donc liées à la mémoire nécessaire pour traiter la matrice globale de rigidité.

Ce travail a consisté à utiliser ces outils tout d'abord pour étudier leur degré de validité aux différentes échelles, leur sensibilité à des paramètres de modélisation et ensuite pour dégager des résultats en vue d'une analyse du comportement macroscopique, intergranulaire et intragranulaire.

Pour l'aspect numérique de la modélisation de milieu polycristallin par des éléments finis, nous retenons, en tous cas pour les formes de lois de comportement locales étudiées, qu'il n'est pas nécessaire de faire figurer beaucoup de points d'intégration dans chaque grain pour la prédiction d'un comportement effectif. Pour nos cas d'étude en petites déformations, nous pouvons assurer obtenir un résultat correct à moins de 1% près avec 9 éléments quadratiques à 20 nœuds (soit 200 à 250 points d'intégration) par grain. Nous l'avons vérifié par comparaison avec d'une part un modèle d'homogénéisation et d'autre part la réponse à convergence de structures de plus en plus raffinées. En faisant figurer moins d'éléments par grain, la réponse globale devient trop rigide car trop dépendante de la rigidité du maillage : le développement d'une déformation propre à un grain n'est plus possible car l'accommodation intergranulaire n'est plus assurée ; le comportement tend alors vers un comportement majoré de type Taylor où chaque grain subit la même déformation. A l'échelle moyenne des grains, l'incertitude de résultat est multipliée par dix environ par

rapport à l'incertitude à l'échelle macroscopique. Pour une représentation correcte du comportement intragranulaire il faut utiliser beaucoup de points d'intégration par grain (au moins 3000) car sinon le risque existe de voir se joindre et se confondre deux méso-structures de déformation qui sont disjointes dans une représentation plus raffinée. Comme par ailleurs des conditions aux limites homogènes au contour peuvent induire une différence de comportement de l'ordre de 20% en moyenne sur une profondeur de 1 à 2 éléments par rapport à des conditions de bords latéraux libres, il convient de toujours faire figurer au moins 4 éléments entre deux bords extérieurs.

Concernant la mécanique des milieux polycristallins, nous retenons que 200 grains d'orientations aléatoires permettent d'obtenir un comportement effectif isotrope et représentatif d'un volume élémentaire à 5% près. Mais ni 40, ni 100 grains ne suffisent, nous l'avons vérifié avec du cuivre. La donnée de la microstructure a une influence équivalente à celle de la donnée des orientations, à hauteur de 1% de variation dans un agrégat à 500 grains. Cependant nous n'avons pas trouvé de corrélation directe entre le comportement moyen d'un grain de polycristal et son homologue monocristallin, malgré l'aspect convergé des réponses et l'équivalence avec un modèle d'homogénéisation. L'interaction entre grains semble donc jouer un rôle quantitatif primordial sur le comportement moyen d'un grain. Ceci se retrouve sur les cartes de distribution des déformations et des quantités de glissement mais aussi sur les courbes de traction de chacun des points d'un grain : l'hétérogénéité de déformation et de contrainte *dans un grain* peut être aussi marquée *qu'entre les grains*, du simple au triple. L'analyse de l'effet moyen d'un joint de grain ou d'une surface libre a conduit à des résultats cohérents, selon lesquels un joint de grain crée un champ local de contrainte plus élevé que la moyenne ; de plus, au voisinage des joints de grains, le nombre de systèmes ayant glissé d'une valeur donnée et la somme des intensités des glissements sont plus élevés qu'au cœur des grains, malgré une déformation équivalente résultant des glissements multiples plus faibles.

Ces résultats appellent d'autres analyses, avec plus de points d'intégration par grain, sur des polycristaux à plus grand nombre de grains afin de s'affranchir complètement de l'effet de bord (notre analyse de l'effet de joint de grain a été faites avec 200 grains, soit environ 6 grains dans chaque direction de l'espace donc comme les grains du bord sont influencés par les conditions au contour il ne reste que $2/3$ des grains à avoir un comportement représentatif), et afin de ne pas avoir de singularité d'hétérogénéité (l'agrégat étudié *m4* comporte deux grains distinctement plus gros que les autres).

L'étude bibliographique sur les aspects expérimentaux nous montre que des cellules intragranulaires délimitées par des structures de dislocations et des désorientations cristallographiques relatives se forment et évoluent au cours de l'écrouissage. Le développement de ces sous-structures de grains est intimement lié au comportement intragranulaire et macroscopique (effet de taille de grain ou de particule). Une des raisons majeures de cette interdépendance vient du fait que plus on restreint l'espace de mobilité d'une dislocation, plus elle risque de rencontrer un obstacle rapidement et consécutivement augmenter les contraintes locales ou bien s'annihiler. Ceci résulte en une variation de comportement au voisinage d'une frontière d'hétérogénéité et si la taille de la zone d'influence n'est pas négligeable par rapport à la taille des hétérogénéités il s'en suit une dépendance à la taille des hétérogénéités. Les contraintes internes sont donc associées à une longueur caractéristique de la microstructure, que ce soit une taille de grain, une taille de cellule ou même l'épaisseur d'une frontière de dislocation et le gradient de désorientation relative. Le modèle de Cosserat présenté en annexe prend en compte une longueur caractéristique qui intervient dans la détermination de la contrainte d'écrouissage : considérant que l'équilibre

n'est pas défini que par des contraintes mais aussi par un couple de contrainte dont la partie duale est un gradient de rotation de réseau cristallin, on peut définir une variable interne décrivant la rotation plastique du réseau avec une loi d'évolution (similaire à celle des glissements) faisant intervenir une longueur caractéristique de la microstructure (paramêtre matériau). Cette variable interne contribue de manière additive à l'écrouissage isotrope sur chaque système. Le modèle convient donc très bien pour reproduire un comportement sensible à la taille caractéristique de la microstructure, que ce soit la taille des grains ou la taille des cellules intragranulaires. Pour le cas où nous modéliserions des grandes déformations, il faudrait songer à faire varier la longueur caractéristique au cours de la déformation, de façon à pouvoir reproduire le rétrécissement des cellules intragranulaires. Il peut être envisageable d'introduire une seconde longueur caractéristique pour modéliser la contribution de cellules à l'intérieur des cellules, ou celle des frontières de dislocations dont l'épaisseur n'est pas toujours négligeable. Pour l'heure seuls deux paramêtres matériau supplémentaires par rapport au modèle classique interviennent pour calculer la contribution de la contrainte couple. L'un définit la taille de la zone d'influence du comportement non local, l'autre est un facteur multiplicatif de la rotation pour déterminer la part de l'écrouissage due à la contrainte couple. La gamme de comportements modélisables est donc très étendue.

Pour finir, les applications actuelles et les perspectives ne se limitent pas à l'approfondissement des résultats présentés dans cette étude. L'étude menée par Eberl a montré que la modélisation d'un multicristal par des éléments finis apportait des résultats très corrects en comparaison des mesures expérimentales [Eberl, 1999]. Le caractère de prédiction du comportement intragranulaire est donc vérifié et on peut raisonnablement envisager de déduire des informations relatives à l'endommagement du milieu. Dans ce cadre il est déjà possible de décrire la rupture intergranulaire à partir de la donnée 2D d'une microstructure [Diard, 2001].
La modélisation du comportement de milieu polycristallin par des éléments finis comporte plusieurs autres enjeux. L'un d'eux consiste à déterminer les paramêtres de loi de transition d'échelle d'un modèle d'homogénéisation : avec l'utilisation d'une loi en β [Cailletaud et Pilvin, 1994, Pilvin, 1996] il est nécessaire d'adapter les paramêtres de cette loi phénoménologique de telle sorte que l'interaction 'réelle' d'un grain avec son voisinage soit reproduite au mieux. Habituellement le réglage de ces paramêtres est effectué par identification du comportement d'un grain du schéma auto-cohérent avec le comportement d'une inclusion EF en interaction avec une matrice homogène décrit avec des éléments finis. On peut aussi maintenant effectuer l'identification avec le comportement d'un grain en interaction avec un voisinage réaliste de polycristal [Barbe et al., 2001d, Parisot, 2001].
Un autre enjeu est poursuivi par Kanit [Kanit, 2000] : la détermination de la taille d'un VER de milieu élastique hétérogène à fort contraste de propriétés par une étude de convergence des réponses effectives quand on augmente *et* le nombre d'hétérogénéités *et* le nombre de degrés de liberté. Les composantes du problème ont beau paraître simples, les résultats sont extrèmement sensibles à la réalisation de microstructure à cause du fort contraste qui distingue les deux phases : il suffit que le caractère percolé de la phase dure soit légèrement modifié pour affecter le chemin des contraintes et par suite le comportement effectif. Son travail est axé sur l'analyse statistique des réalisations de microstructures (combien faut-il faire figurer de polyèdres dans la microstructure pour avoir un VER géométrique *i.e.* un élément de volume où les fractions volumiques de phases sont reproduites d'une réalisation à l'autre ? -il en faut au moins plusieurs milliers-) et sur l'analyse statistique des réponses effectives (l'exigence en nombre de polyèdres est moindre que pour atteindre la convergence géométrique).

Parmi d'autres perspectives il est question :

- d'intégrer la modélisation de milieu polycristallin à l'échelle microscopique dans un calcul multi-échelle du type FE^2 proposé par Feyel [Feyel et Chaboche, 2000], où les points de Gauss d'un maillage global ont un comportement défini par calcul EF d'un VER,
- d'étendre notre modélisation aux sollicitations en grandes déformations,
- d'introduire des lois de comportement non locales dans des calculs à plus grand nombre de degrés de liberté afin d'étudier tant les effets de taille d'hétérogénéité sur le comportement effectif que la contribution des modèles non locaux pour la représentation de sous-structures de grains.

Ce dernier point constitue un pas essentiel vers plus de crédibilité de la modélisation numérique auprès des physiciens : la distinction des lois de comportement d'un point à un autre est alors permise pour la détermination, tant de l'effet de surface libre, que de l'effet d'un joint de grain. Il y a bien sûr d'autres enjeux et ils ont d'autant plus lieu d'être que les capacités numériques vont continuer à augmenter considérablement.

Bibliographie

ACHARYA A. ET BASSANI J. L. (2000). *Lattice incompatibility and a gradient theory of crystal plasticity*. J Mech Phys Sol, vol. 48 n° 8, pp 1565–1796.

ACHARYA A. ET BEAUDOIN A. J. (2000). *Grain size effect in viscoplastic polycrystals at moderate strains.* J Mech Phys Sol, vol. 48 n° 10, pp 2213–2230.

ALLAIS L., BORNERT M., BRETHEAU T., ET CALDEMAISON D. (1994). *Experimental characterization of the local strain field in a heterogeneous elastoplastic material*. Acta metall mater, vol. 42 n° 11, pp 3865–3880.

ARMSTRONG R.W. (1970). *The Influence Of Polycrystal Grain Size on Several Mechanical Properties of Materials*. Metall Trans, vol. 1, pp 1169–1177.

ARMSTRONG R., CODD I., DOUTHWAITE R.M., ET PETCH N.J. (1962). *The Plastic Deformation of Polycrystalline Aggregates*. Phil Mag, vol. 7 n° 73, pp 45–58.

ASARO ROBERT J. (1983). *Crystal Plasticity*. J. Appl. Mech., vol. 50, pp 921–934.

ASHBY M.F. (1970). *The Deformation of Plastically Non-homogeneous Materials*. Phil Mag, vol. 21, pp 399–424.

BACHU VENUGOPAL ET KALIDINDI SURYA R. (1998). *On the accuracy of the predictions of texture evolution by the finite element technique for fcc polycrystals*. Mat Sc Engng, vol. A257, pp 108–117.

BARANGER CHRISTOPHE (1995). *Méthodes de résolution de grands systèmes appliquées aux calculs de structures par éléments finis*. Thèse de Doctorat, Université de Technologie de Compiègne.

BARBE F., CAILLETAUD G., ET FOREST S. (1999). *F.E. study of the surface effect in polycrystalline aggregates*. In : Trans. of the 15th Int. Conf. on Structural Mechanics in Reactor Technology, éd. Sung Pil Chang, vol. XII, pp 17–28, Seoul, Korea. SMIRT-15, Korean Nuclear Society.

BARBE F., DECKER L., JEULIN D., ET CAILLETAUD G. (2001a). *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model*. Int J Plasticity, vol. 17, pp 513–536.

BARBE F., FOREST S., ET CAILLETAUD G. (2001b). *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: results*. Int J Plasticity, vol. 17, pp 537–563.

BARBE F., FOREST S., ET CAILLETAUD G. (2001c). *Polycrystalline plasticity under small strains. Microstructure refinment*. In : NATO Proceedings, Physical Aspects of Fracture, éd. E. Bouchaud et al. Kluwer Publisher.

BARBE F., PARISOT R., FOREST S., ET CAILLETAUD G. (2001d). *Calibrating a homogenization polycrystal model from large scale FE computations of polycrystalline aggregates*. to appear in J Phys IV.

BATE PETER (1999). *Modelling deformation microstructure with the crystal plasticity finite-element method*. Phil Trans R Soc London A, vol. 357, pp 1589–1601.

BEAUDOIN A.J., DAWSON P.R., MATHUR K.K., ET KOCKS U.F. (1995). *A hybrid finite element formulation for polycrystal plasticity with consideration of macrostructural and microstructural linking*. Int J Plasticity, vol. 11, pp 501–521.

BEAUDOIN A.J., MATHUR K.K., DAWSON P.R., ET JOHNSON G.C. (1993). *Three–dimensional deformation process simulation with explicit use of polycrystal plasticity models*. Int J Plasticity, vol. 9, pp 833–860.

BEAUDOIN A. J., ACHARYA A., CHEN S. R., KORZEKWA D. A., ET STOUT M. G. (2000). *Consideration of grain-size effect and kinetics in the plastic deformation of metal polycrystals*. Acta mater, vol. 48, pp 3409–3423.

BECKER R. (1991). *Analysis of texture evolution in channel die compression –I. Effects of grain interaction*. Acta metall mater, vol. 39 n° 6, pp 1211–1230.

BECKER R. ET PANCHANADEESWARAN S. (1995). *Effects of grain interactions on deformation and local texture in polycrystals*. Acta metall mater, vol. 43 n° 7, pp 2701–2719.

BERADAI CH., BERVEILLER M., ET LIPINSKI P. (1987). *Plasticity of metallic polycrystals under complex loading path*. Int J Plasticity, vol. 3, pp 143–162.

BERTRAM A., BOEHLKE T., DUDERSTADT F., ET KRASKA M. (1998). *Berechnung der Texturentwicklung und verformungsinduzierten Anisotropie metallischer Polykristalle*. In : GAMM Annual meeting, Bremen. to appear in ZAMM.

BERVEILLER M. ET ZAOUI A. (1979). *An Extension of the Self–Consistent Scheme to Plastically Flowing Polycrystal*. J Mech Phys Sol, vol. 26, pp 325–344.

BESSON J. ET FOERCH R. (1998). *Object–Oriented Programming Applied to the Finite Element Method. Part I. General Concepts*. Revue Européenne des Éléments Finis, vol. 7 n° 5, pp 535–566.

BESSON J., LERICHE R., FOERCH R., ET CAILLETAUD G. (1998). *Object–Oriented Programming Applied to the Finite Element Method. Part II. Application to Material Behaviors*. Revue Européenne des Éléments Finis, vol. 7 n° 5, pp 567–588.

BISHOP J.F.W. ET HILL R. (1951). *A theory for the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses*. Phil Mag, vol. 42, pp 414–427.

BOURGEOIS S., DESBORDES O., ET GALLIET I. (1999). *Une approche parallèle pour le calcul de structures polycristallines*. In : Quatrième Colloque National en Calcul de Structures, vol. 2, pp 811–816. Giens, France.

BRETHEAU T. ET CALDEMAISON D. (1981). *Test of mechanical interaction models between polycrystal grains by means of local strain measurements*. In : Deformation of Polycrystals: Mechanisms and Microstructures, éds. Hansen N., Horsewell A., Leffers T., et Lilholt H., pp 157–161. 2nd Riso International Symposium on Metallurgy and Materials Science, Riso National Laboratory, Roskilde, Denmark.

BROWN N. ET LUKENS K.F. (1961). *Microstrain in polycrystalline metals*. Acta Metall, vol. 9, pp 106–111.

BRÜNIG MICHAEL, BERGER SIMONE, ET OBRECHT HANS (2000). *Numerical simulation of the localization behavior of hydrostatic-stress-sensitive metals*. Int J Mech Sci, vol. 42, pp 2147–2166.

BUDIANSKI B. ET WU T.T. (1962). *Theoretical Prediction of Plastic Strains of Polycrystals*. In : Proc. 4th US Nat. Cong. Appl. Mech., pp 1175–1185.

BUSSO E.P. (1990). *Cyclic Deformation of Monocrystalline Nickel Aluminide and High Temperature Coatings*. Thèse de Doctorat, Massachussets Institute of Technology.

BUTLER G.C., GRAHAM S., MCDOWELL D.L., STOCK S.R., ET FERNEY V.C. (1998). *Application of the Taylor Polycrystal Plasticity Model to Complex Deformation Experiments*. J Engng Mat Technol, vol. 120, pp 197–205.

BUTLER GEORGE C. ET MCDOWELL DAVID L. (1998). *Polycrystal constraint and grain subdivision*. Int J Plasticity, vol. 14 n° 8, pp 703–717.

CAILLETAUD GEORGES (1987). *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6.

CAILLETAUD G. (1992). *A Micromechanical Approach to Inelastic Behaviour of Metals*. Int J Plasticity, vol. 8, pp 55–73.

CAILLETAUD G. ET CHABOCHE J.L. (1996). *Integration Methods for Complex Plastic Constitutive Equations*. Comput Meth Appl Mech Engng, vol. 133, pp 125–155.

CAILLETAUD G. ET PILVIN P. (1994). *Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis*. Revue Européenne des Éléments Finis, vol. 3 n° 4, pp 515–541.

CANOVA G.R., WENK H.R., ET MOLINARI A. (1992). *Deformation modelling of multi-phase polycrystals: case of quartz-mica aggregate*. Acta metall mater, vol. 40 n° 7, pp 1519–1530.

COTTRELL A.H. (1964). *The mechanical properties of matter*. Wiley, New York.

CUITIÑO A. ET ORTIZ M. (1991). *The hardening of single crystals*. In : Proc. of the int. seminar Mecamat'91: Large Plastic Deformations, Fundamental Aspects and Applications to Metal Forming, éds. Teodosiu C., Raphanel J. L., et Sidoroff F., Fontainebleau, France:39–51.

CUITIÑO A. M. (1997). *A time-dependent deformation mechanism in metallic f.c.c. crystals*. Acta mater, vol. 45 n° 6, pp 2509–2522.

DAME L.T. ET STOUFFER D.C. (1986). *Anisotropic Constitutive Models for Nickel Base Single Crystal Alloys: Development and Finite Element Implementation*. Cr-175015, NASA.

DAWSON P.R. ET MARIN E.B. (1998). *Computational Mechanics for Metal Deformation Processes Using Polycrystal Plasticity*. Adv. Appl. Mech., vol. 34, pp 77–169.

DECKER L. ET JEULIN D. (2000). *Simulation 3D de matériaux aléatoires polycristallins*. Revue de Métallurgie, CIT/Science et Génie des Matériaux, vol. February, pp 271–275.

DELAIRE F., RAPHANEL J.L., ET REY C. (2000). *Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension: experimental study and finite element simulations*. Acta mater, vol. 48, pp 1075–1087.

DIARD OLIVIER (2001). *Modélisation des modes de rupture des gaines de crayons combustibles en condition d'Interaction Pastille-Gaine*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

DOLLAR M. ET GORCZYCA S. (1982). *The effect of grain size on polycrystal hardening*. Scripta Metall, vol. 16 n° 8, pp 901–906.

EBERL FRANK (1999). *Second Order Heterogeneities in a Multicrystal: Experimental Developments using X-Ray Diffraction and Comparison with a Finite Element Model*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers.

ENGEL J.J. (1978). *Modélisation du comportement global des métaux en plasticité et en viscoplasticité*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

ESHELBY J.D. (1957). *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems*. Proc R Soc London A, vol. 241, pp 376–396.

ESTRIN Y., L.S. TÓTH A. MOLINARI, ET BRÉCHET Y. (1998). *A dislocation–based model for all hardening stages in large strain deformation*. Acta mater, vol. 46 n° 15, pp 5509–5522.

FAHRAT C. ET ROUX FRANÇOIS-XAVIER (1994). *Implicit Parallel Processing in Structural Mechanics*. Comput Mech Adv, vol. 2 n° 1.

FEYEL FRÉDÉRIC (1998). *Application du calcul parallèle aux modèles à grand nombre de variables internes*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

FEYEL F., CAILLETAUD G., KRUCH S., ET ROUX F.X. (1997). *Application du calcul parallèle aux modèles à grand nombre de variables internes*. In : Colloque National en calcul de structures, May 20-23. Giens, France.

FEYEL F. ET CHABOCHE J.-L. (2000). *FE^2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials*. Comput Meth Appl Mech Engng, vol. 183, pp 309–330.

FIVEL M., TABOUROT L., RAUCH E., ET CANOVA G. (1998). *Identification through mesoscopic simulations of macroscopic parameters of physically based constitutive equations for the plastic behaviour of fcc single crystals*. J Phys IV, vol. 8 n° 8, pp 151–8.

FLECK N.A., MULLER G.M., ASHBY M.F., ET HUTCHINSON J.W. (1994). *Strain Gradient Plasticity: Theory and Experiment*. Acta metall mater, vol. 42 n° 2, pp 475–487.

FOREST S. (1998). *Modeling slip, kink and shear banding in classical and generalized single crystal plasticity*. Acta mater, vol. 46 n° 9, pp 3265–3281.

FOREST S., BARBE F., ET CAILLETAUD G. (2000). *Cosserat modelling of size effects in crystals*. Int J Sol Struct, vol. 37 n° 46-47, pp 7105–7126.

FOREST S. ET CAILLETAUD G. (1995). *Strain localisation in single crystals: bifurcation analysis, effects of boundaries and interfaces*. Eur J Mech, A/Solids, vol. 14, pp 747–771.

FOREST S., CAILLETAUD G., ET SIEVERT R. (1997). *A Cosserat theory for elastoviscoplastic single crystals at finite deformation*. Archives of Mechanics, vol. 49 n° 4, pp 705–736.

FOURIE J.T. (1967). *The Flow Stress Gradient between the Surface and Centre of Deformed Copper Single Crystals*. Phil Mag, vol. 15, pp 735–756.

GHOSH SOMNATH, LEE KYUNGHOON, ET MOORTHY SURESH (1995). *Multiple scale analysis of heterogeneous elastic structures using homogenization theory and Voronoï Cell finite element method*. Int J Sol Struct, vol. 32 n° 1, pp 27–62.

GHOSH SOMNATH ET MOORTHY SURESH (1995). *Elastic-plastic analysis of arbitrary heterogeneous materials with the Voronoï Cell finite element method*. Comput Meth Appl Mech Engng, vol. 121, pp 373–409.

GILBERT E.N. (1962). *Random subdivisions of space into crystals*. Ann. Math. Stat., vol. 33.

GODFREY A., JUUL JENSEN D., ET HANSEN N. (1998). *Slip pattern, microstructure and local crystallography in an aluminium single crystal of brass orientation {110}<112>*. Acta mater, vol. 46 n° 3, pp 823–833.

GOTOH M. (1978). *A Finite Element Formulation for Large Elastic–Plastic Deformation Analysis of Polycrystals and some Numerical Considerations on Polycrystalline Plasticity*. Int. J. Num. Meth. Engng., vol. 12, pp 101–114.

GOTTE L., MENDEZ J., VILLECHAISE P., ET VIOLAN P. (1996). *Effect of the grain size on low cycle fatigue of copper polycrystals*. In : Fatigue '96, éds. Lütjering G. et Nowack H., vol. 1, pp 167–172, Berlin, Germany. Sixth international fatigue congress, Pergamon, Elsevier.

GRATIN C. (1992). *Xlim3d : un logiciel de traitement d'images tridimensionnelles*. Ecole des Mines de Paris, Tech Rep N-9/92/EMP edition.

GRATIN C. (1993). *De la représentation des images au traitement morphologique d'images tridimensionnelles*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

GRATIN C. ET MEYER F. (1992). *Mathematical morphology in three dimensions*. Acta Stereologica, vol. suppl.1, pp 551–558.

GUPTA ANSHUL, KARYPIS GEORGE, ET KUMAR VIPIN (1997). *Highly Scalable Parallel Algorithms for Sparse Matrix Factorization*. Tech. Rep., http://www.cs.umn.edu/users/kumar/papers.html, vol. .

HANSEN N. (1977). *The effect of grain size and strain on the tensile flow stress of aluminium at room temperature*. Acta Metall, vol. 25, pp 863–869.

HANSEN NIELS ET JENSEN DORTE JUUL (1999). *Development of microstructure in FCC metals during cold work*. Phil Trans R Soc London A, vol. 357, pp 1447–1469.

HANSEN N. ET RALPH B. (1982). *The strain and grain size dependence of the flow stress of copper*. Acta Metall, vol. 30, pp 411–417.

HARDER JÖRN (1999). *A crystallographic model for the study of local deformation processes in polycrystals*. Int J Plasticity, vol. 15 n° 6, pp 605–624.

HARREN S.V. ET ASARO R.J. (1989). *Nonuniform Deformations in Polycrystals and Aspects of the Validity of the Taylor Model*. J Mech Phys Sol, vol. 37, pp 191–232.

HAVLICEK F., KRATOCHVIL J., TOKUDA M., ET LEV V. (1990). *Finite element model of plastically deformed multicrystal*. Int J Plasticity, vol. 6, pp 281–291.

HAVLICEK F., TOKUDA M., HINO S., ET KRATOCHVIL J. (1992). *Finite element method analysis of micro-macro transition in polycrystalline plasticity*. Int J Plasticity, vol. 8, pp 477–499.

HESS FELIX (1993). *Anisotropic strain hardening in polycrystalline copper and aluminium*. Int J Plasticity, vol. 9, pp 405–420.

HILL R. (1965). *Continuum Micro–Mechanisms of Elastoplastic Polycrystals*. J Mech Phys Sol, vol. 13, pp 89–101.

HIRTH J.P. (1972). *The influence of Grain Boundaries on Mechanical Properties*. Metall Trans, vol. 3, pp 3047–3067.

HUET C. (1990). *Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies*. J Mech Phys Sol, vol. 38, pp 813–841.

HULL D. (1961). *Effect of grain size and temperature on slip, twinning and fracture in 3% silicon iron*. Acta Metall, vol. 9, pp 191–204.

HUTCHINSON J.W. (1966). *Elastic–Plastic Behaviour of Polycrystalline Metals and Composites*. Proc R Soc London, vol. A319, pp 247–272.

HUTCHINSON J.W. (2000). *Plasticity at the micron scale*. Int J Sol Struct, vol. 37, pp 225–238.

JEULIN D. (1989). *Morphological modeling of images by sequential random functions*. Signal Processing, vol. 16.

JIANG ZHONGHAO, LIAN JIANSHE, ET BAUDELET B. (1995). *A dislocation density approximation for the flow stress-grain size relation of polycrystals*. Acta metall mater, vol. 43 n° 9, pp 3349–3360.

JOHNSON W.A. ET MEHL R.F (1939). *Reaction kinetics in processes of nucleation and growth*. Trans. Am. Inst. Min. Engrs., vol. 135, pp 416–458.

JOHNSTON T.L. ET FELTNER C.E. (1970). *Grain Size Effects in the Strain Hardening of Polycrystals*. Metall Trans, vol. 1, pp 1161–1167.

JONES R.L. ET CONRAD H. (1969). *The Effect of Grain Size on the Strength of Alpha-Titanium at Room Temperature*. Trans Met Soc AIME, vol. 245, pp 779–789.

JORDAN E. ET WALKER K.P. (1984). *Biaxial Constitutive Modeling and testing of Single Crystals at Elevated Temperature*. In : Conference on Multiaxial Fatigue, Sheffield (UK).

KALIDINDI S.R., BRONKHORST C.A., ET ANAND L. (1992). *Crystallographic Evolution in Bulk Deformation Processing of FCC metals*. J Mech Phys Sol, vol. 40, pp 537–569.

KALIDINDI SURYA R. (1998). *Modeling the strain hardening response of low SFE FCC alloys*. Int J Plasticity, vol. 14 n° 12, pp 1265–1277.

KANIT TOUFIK (2000). *Determination of representative volume element for random microstructures*. contrat SRA1.3/PS00085 1131, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

KHAN A.S. ET CHENG P. (1996). *An anisotropic elastic-plastic constitutive model for single and polycrystalline metals. I–Theoretical developments*. Int J Plasticity, vol. 12 n° 2, pp 147–162.

KOCKS U.F. (1970). *The Relation Between Polycrystal Deformation and Single-Crystal Deformation*. Metall Trans, vol. 1, pp 1121–1143.

KOCKS U.F. ET BROWN T.J. (1966). *Latent Hardening in Aluminium*. Acta Metall, vol. 14, pp 87–98.

KOCKS U. F. ET CANOVA G. R. (1981). *How many slip systems, and which?* In : Deformation of Polycrystals: Mechanisms and Microstructures, éds. Hansen N., Horsewell A., Leffers T., et Lilholt H., pp 35–44. 2nd Riso International Symposium on Metallurgy and Materials Science, Riso National Laboratory, Roskilde, Denmark.

KRÖNER E. (1961). *Zur plastischen Verformung des Vielkristalls*. Acta Metall, vol. 9, pp 155–161.

KRÖNER E. (1980). *Linear properties of random media. The systématic theory*. In : Comportements rhéologiques et structure des matériaux, éd. CR 15ème Coll. Groupe Francais de Rhéologie, pp 15–40.

KUHLMANN-WILSDORF D. (1999). *The theory of dislocation-based crystal plasticity*. Phil Mag A, vol. 79 n° 4, pp 955–1008.

KUHLMANN-WILSDORF D. ET HANSEN N. (1991). *Geometrically necessary, incidental and subgrain boundaries*. Scripta Metall Mater, vol. 25, pp 1557–1562.

KUHLMANN-WILSDORF D. ET WILSDORF H.G.F. (1963). *On the Origin of Dislocation Tangles and Long Prismatic Dislocation Loops in Deformed Crystals*. In : Electron Microscopy and Strength of Crystals, éds. Thomas Gareth et Washburn Jack, pp 575–604, Berkeley, California. 1st Berkeley Int Mat Conf "The Impact of Transmission Electron Microscopy on Theories of the Strength of Crystals", Interscience.

LEDERICH R.J., SASTRY S.M., O'NEAL J.E., ET RATH B.B. (1978). *The Effect of Grain Size on Yield Stress and Work Hardening of Polycrystalline Titanium at 295 K and 575 K*. Mat Sc Engng, vol. 33, pp 183–188.

LEFFERS TORBEN (1981). *Microstructures and mechanisms of polycrystal deformation at low temperature*. In : Deformation of Polycrystals: Mechanisms and Microstructures, éds. Hansen N., Horsewell A., Leffers T., et Lilholt H., pp 55–71. 2nd Riso International Symposium on Metallurgy and Materials Science, Riso National Laboratory, Roskilde, Denmark.

LI JAMES C.M. (1963). *Petch Relation and Grain Boundary Sources*. Trans Met Soc AIME, vol. 227, pp 239–247.

LIN T.H. (1957). *Analysis of Elastic and Plastic Strains of Face Centered Cubic Crystal*. J Mech Phys Sol, vol. 5, pp 143–149.

LIPPMANN N., STEINKOPFF TH., SCHMAUDER S., ET GUMBSCH P. (1997). *3D-Finite-Element-Modelling of Microstructures with the Method of Multiphase Elements*. Comput Mat Sc, vol. .

LIU Q. ET HANSEN N. (1995). *Geometrically necessary boundaries and incidental dislocation boundaries formed during cold deformation*. Scripta Metall Mater, vol. 32, pp 1289–1295.

LIU Q., JENSEN D. JUUL, ET HANSEN N. (1998). *Effect of grain interaction on deformation structure in cold–rolled polycrystalline aluminium*. Acta mater, vol. 46 n° 16, pp 5819–5838.

MANDEL JEAN (1965). *Une généralisation de la théorie de la plasticité de W.T. Koiter*. Int J Sol Struct, vol. 1, pp 273–295.

MCGINTY ROBERT D. ET MCDOWELL DAVID L. (1999). *Multiscale Polycrystal Plasticity*. J Engng Mat Technol, vol. 121, pp 203–209.

MEAKIN J.D. ET PETCH N.J. (1974). *Strain–hardening of polycrystals: the α–brasses*. Phil Mag, vol. 29, pp 1149–1156.

MECKING H. (1981). *Low temperature deformation of polycrystals*. In : Deformation of Polycrystals: Mechanisms and Microstructures, éds. Hansen N., Horsewell A., Leffers T., et Lilholt H., pp 73–86. 2nd Riso International Symposium on Metallurgy and Materials Science, Riso National Laboratory, Roskilde, Denmark.

MÉRIC LAURENT (1991). *Une modélisation mécanique du comportement des monocristaux*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

MÉRIC L., CAILLETAUD G., ET GASPÉRINI M. (1994). *F.E. Calculations of Copper Bicrystal Specimens Submitted to Tension–Compression Tests*. Acta Metall, vol. 42 n° 3, pp 921–935.

MÉRIC LAURENT, POUBANNE PHILIPPE, ET CAILLETAUD GEORGES (1991). *Single Crystal Modeling for Structural Calculations. Part 1: Model Presentation*. J Engng Mat Technol, vol. 113, pp 162–170.

MEYER F. (1990). *Algorithmes à base de files d'attente hiérarchiques*. Technical Report N46/90/MM, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

MEYER F. (1992). *Un algorithme optimal de ligne de partage des eaux*. In : Proceedings of the Fourth International Conference on Image Processing and its Applications, Maastricht:303-306.

MEYER F. ET BEUCHER S. (1990). *Morphological Segmentation*. J. Visual Communication and Image Representation, vol. 1 n° 1, pp 21–46.

MEYERS MARC A. ET ASHWORTH E. (1982). *A model for the effect of grain size on the yield stress of metals*. Phil Mag A, vol. 46 n° 5, pp 737–759.

MIKA D.P. ET DAWSON P.R. (1999). *Polycrystal plasticity modeling of intracrystalline boundary textures*. Acta mater, vol. 47 n° 4, pp 1355–1369.

MIKA DAVID P. ET DAWSON PAUL R. (1998). *Effects of grain interaction on deformation in polycrystals*. Mat Sc Engng, vol. A257, pp 62–76.

MOLINARI A., CANOVA G.R., ET AHZI S. (1987). *A Self Consistent approach of the Large Deformation Polycrystal Viscoplasticity*. Acta Metall, vol. 35, pp 2983.

MUELLER H. ET HAESSNER F. (1981). *Influence of grain size and texture on the flow stress of zinc*. Scripta Metall, vol. 15, pp 487–492.

MUGHRABI H. (1970). *Investigations of Plastically Deformed Copper Single Crystals in the Stress-Applied State*. Physica Status Solidi, vol. 39, pp 317–327.

MUGHRABI H. (1992). *Introduction to the Viewpoint Set on : Surface Effect in Cyclic Deformation and Fatigue*. Scripta Metall Mater, vol. 26, pp 1499–1504.

NAGARJUNA S., SRINIVAS M., BALASUBRAMANIAN K., ET SARMA D.S. (1996). *The alloy content and grain size dependence of flow stress in Cu-Ti alloys*. Acta mater, vol. 44 n° 6, pp 2285–2293.

NAKADA Y. ET CHALMERS B. (1964). *Effects of Surface Conditions on the Stress-Strain Curves of Aluminium and Gold Single Crystals*. Trans. Met. Soc. of AIME, vol. 230, pp 1339–1344.

NARUTANI T. ET TAKAMURA J. (1991). *Grain-size strengthening in terms of dislocation density measured by resistivity*. Acta metall mater, vol. 39 n° 8, pp 2037–2049.

NEMAT-NASSER SIA ET LI YULONG (1998). *Flow stress of f.c.c. polycrystals with application to OFHC Cu*. Acta mater, vol. 46 n° 2, pp 565–577.

NING J. ET AIFANTIS E. C. (1996). *Anisotropic yield and plastic flow of polycrystalline solids*. Int J Plasticity, vol. 12 n° 10, pp 1221–1240.

ORTIZ M., REPETTO E. A., ET STAINIER L. (2000). *A theory of subgrain dislocation structures*. J Mech Phys Sol, vol. 48, pp 2077–2114.

PANGBORN R.N., WEISSMANN S., ET KRAMER I.R. (1981). *Dislocations Distribution and Prediction of Fatigue Damage*. Metall Trans, vol. 12A, pp 109–120.

PARISOT RODOLPHE (2001). *Etude des modes de déformation et d'endommagement du zinc sur tôles galvanisées*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

PARISOT R., FOREST S., GOURGUES A.-F., PINEAU A., ET MAREUSE D. (2001). *Modeling the mechanical behavior of a multicrystalline zinc coating on a hot-dip galvanized steel sheet*. Computational Materials Science, vol. 19, pp 189–204.

PETCH N.J. (1953). *The Cleavage Strength of Polycrystals*. J Iron Steel Inst, vol. 174 n° 1, pp 25–28.

PETIT J. ET MENDEZ J. (1996). *Some aspects of the influence of microstructure on fatigue*. In : Fatigue '96, éds. Lütjering G. et Nowack H., vol. 1, pp 15–26, Berlin, Germany. Sixth international fatigue congress, Pergamon, Elsevier.

PILVIN PHILIPPE (1996). *The Contribution of Micromechanical Approaches to the Modelling of Inelastic Behaviour of Polycrystals*. In : Fourth Int. Conf. on Biaxial/multiaxial Fatigue and Design, éds. Pineau André, Cailletaud Georges, et Lindley Trevor, pp 3–19, London. ESIS 21, Mechanical Engineering Publications.

PILVIN P. (1998). *Une approche simplifiée pour schématiser l'effet de surface sur le comportement mécanique d'un polycristal*. J Phys IV, vol. 8, pp Pr4/33–Pr4/38.

QUILICI S. ET CAILLETAUD G. (1997). *Finite Element Computations of Multicrystalline Aggregates*. In : Plasticity'97, éd. Kahn A.S., pp 243–245, Juneau, Alaska.

QUILICI S. ET CAILLETAUD G. (1999). *F.E. simulation of macro-, meso- and micro- scales in polycrystalline plasticity*. Comput Mat Sc, vol. 16 n° 1–4, pp 383–390.

QUILICI S., FOREST S., ET CAILLETAUD G. (1998). *On size effects in torsion of multi- and polycrystalline specimens*. J Phys IV, vol. 8, pp Pr8–197–205.

RAGNEMALM I. (1992). *Fast erosion and dilation by contour processing and thresholding of distance maps*. Pattern Recognition Letters, vol. 13 n° 3, pp 161–166.

RUSSEL T.L., WOOD D.S., ET CLARK D.S. (1961). *The influence of grain size on the yield phenomenon in steel*. Acta Metall, vol. 9, pp 1054–1063.

SAADA G. (1963). *Dislocation Interactions and Plastic Deformation of Crystals*. In : Electron Microscopy and Strength of Crystals, éds. Thomas Gareth et Washburn Jack, pp 651–663, Berkeley, California. 1st Berkeley Int Mat Conf "The Impact of Transmission Electron Microscopy on Theories of the Strength of Crystals", Interscience.

SAB K. (1992). *On the homogenization and the simulation of random materials*. Eur J Mech, A/Solids, vol. 11 n° 5, pp 585–607.

SARMA GORTI B. ET DAWSON PAUL R. (1996a). *Effects of Interactions Among Crystals on the Inhomogeneous Deformation of Polycrystals*. Acta mater, vol. 44, pp 1937.

SARMA GORTI B. ET DAWSON PAUL R. (1996b). *Texture predictions using a polycrystal plasticity model incorporating neighbor interactions*. Int J Plasticity, vol. 12 n° 8, pp 1023–1054.

SAUZAY M. ET GILORMINI P. (1999). *Surface Effect, Fatigue and Microplasticity*. In : 4th Int. Conf. on Constitutive Laws in Engineering Materials, Troy, USA.

SHU J.Y. ET FLECK N.A. (1999). *Strain gradient crystal plasticity: size-dependent deformation of bicrystals*. J Mech Phys Sol, vol. 47, pp 297–324.

SIMO J.C. ET TAYLOR R.L. (1985). *Consistent Tangent Operators for Rate Independent Elasto–Plasticity*. Comput Meth Appl Mech Engng, vol. 48, pp 101–118.

SOH AI KAH (2000). *Development of special multi-material elements*. Int J Sol Struct, vol. 37, pp 899–918.

STAROSELSKI A. ET ANAND L. (1998). *Inelastic deformation of polycrystalline face centered cubic materials by slip and twinning*. J Mech Phys Sol, vol. 46 n° 4, pp 671–696.

SUN S., ADAMS B.L., ET KING W.E. (2000). *Observations of lattice curvature near the interface of a deformed aluminium bicrystal*. Phil Mag A, vol. 80 n° 1, pp 9–25.

SWANN P. R. (1963). *Dislocation Arrangements in Face-Centered Cubic Metals and Alloys*. In : Electron Microscopy and Strength of Crystals, éds. Thomas Gareth et Washburn Jack, pp 131–181, Berkeley, California. 1st Berkeley Int Mat Conf "The Impact of Transmission Electron Microscopy on Theories of the Strength of Crystals", Interscience.

SWANSON G.A. ET BILL R.C. (1985). *Life Prediction and Constitutive Models fo Engine Hot Section Anisotropic Materials*. In : AIAA/SAE/ASME/ASEE 21th Joint Propulsion Conference, Monterey.

TABATA TEIZO, FUJITA HIROSHI, HIRAOKA MASA-AKI, ET MIYAKE SEIKA (1982). *The relationship between flow stress and dislocation behaviour in [111] aluminium single crystals*. Phil Mag A, vol. 46 n° 5, pp 801–816.

TABOUROT L., FIVEL M., ET RAUCH E. (1997). *Generalised constitutive laws for f.c.c. single crystals*. Mat Sc Engng, vol. A234-236, pp 639–642.

TAKAHASHI HIROSHI (1988). *Predictions of plastic stress-strain relations of polycrystals based on the Lin model*. Int J Plasticity, vol. 4, pp 231–250.

TAKAHASHI H., FUJIWARA K., ET NAKAGAWA T. (1998). *Multiple–slip work–hardening model in crystals with application to torsion–tension behaviors of aluminium tubes*. Int J Plasticity, vol. 14 n° 6, pp 489–509.

TAKAHASHI H., MOTOHASHI H., TOKUDA M., ET ABE T. (1994). *Elastic-plastic finite element polycrystal model*. Int J Plasticity, vol. 10 n° 1, pp 63–80.

TAYLOR G.I. (1938). *Plastic Strain in Metals*. J. Inst. Metals, vol. 62, pp 307–324.

TEODOSIU C., RAPHANEL J.L., ET TABOUROT L. (1991). *Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals*. In : Proc. of the int. seminar Mecamat'91: Large Plastic Deformations, Fundamental Aspects and Applications to Metal Forming, éds. Teodosiu C., Raphanel J.L., et Sidoroff F., Fontainebleau, France:153–168.

TERADA KENJIRO, HORI MUNEO, KYOYA TAKASHI, ET KIKUCHI NOBORU (2000). *Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches*. Int J Sol Struct, vol. 37, pp 2285–2311.

THOMPSON A.W. (1975). *Yielding in nickel as a function of grain or cell size*. Acta Metall, vol. 23, pp 1337–1342.

THOMPSON A.W. ET BACKOFEN W.A. (1971). *The effect of grain size on fatigue*. Acta Metall, vol. 19, pp 597–606.

THOMPSON ANTHONY W. (1974). *An evaluation of the Ashby model for grain boundary hardening*. Phil Mag, vol. , pp 1125–1132.

THOMPSON ANTHONY W. ET BASKES MICHAEL I. (1973). *The influence of grain size on the work hardening of face-centred cubic polycrystals*. Phil Mag, vol. 28, pp 301–308.

THOMPSON ANTHONY W., BASKES MICHAEL I., ET FLANAGAN WILLIAM F. (1973). *The dependence of polycrystal work hardening on grain size*. Acta Metall, vol. 21, pp 1017–1028.

TJERKSTRA H.H. (1961). *The effect of grain size on the stress-strain curve of α-iron and the connection with the plastic deformation of the grain boundaries*. Acta Metall, vol. 9, pp 259–263.

TOKUDA MASATAKA, KRATOCHVIL JAN, ET OHNO NOBUTADA (1985). *Inelastic behaviour of polycrystalline metals under complex loading condition*. Int J Plasticity, vol. 1, pp 141–150.

TURNBULL A. ET DE LOS RIOS E.R. (1995). *The effect of grain size, strain and temperature on the monotonic stress-strain behaviour of polycrystalline aluminium and Al alloys*. Fatigue Fract Engng Mater Struct, vol. 18 n° 11, pp 1343–1354.

UNGÁR T., LANGFORD J.I., CERNIK R.J., VÖRÖS G., PFLAUMER R., OSZLÁNYI G., ET KOVÁCS I. (1998). *Microbeam X-Ray diffraction study of structural properties of polycrystalline metals by means of synchrotron radiation*. Mat Sc Engng, vol. A247, pp 81–87.

UNGAR T., MUGHRABI H., ET WILKENS M. (1982). *An X-Ray Line-broadening Study of Dislocations near the Surface and in the Bulk of Deformed Copper Single Crystals*. Acta Metall, vol. 30, pp 1861–1867.

VAN SWYGENHOVEN H., SPACZER M., ET CARO A. (1999). *Microscopic description of plasticity in computer generated metallic nanophase samples: a comparison between Cu and Ni*. Acta mater, vol. 47 n° 10, pp 3117–3126.

WATANABE OSAMU, ZBIB HUSSEIN M., ET TAKENOUSHI EIJI (1998). *Crystal plasticity: micro-shear banding in polycrystals using Voronoï tessalation*. Int J Plasticity, vol. 14 n° 8, pp 771–788.

WENG G.J. (1987). *Anisotropic hardening in single crystals and the plasticity of polycrystals*. Int J Plasticity, vol. 3, pp 315–339.

WENG G.J. (1993). *A self-consistent relation for the time-dependent creep of polycrystals*. Int J Plasticity, vol. 9, pp 181–198.

WERT J. (1982). *The Flow Stress-Grain Size Relationship in a Precipitation-hardening Al Alloy*. In : Strength of metals and alloys, éd. Gifkins R. C., vol. 1, pp 339–344, Melbourne, Australia. ICSMA 6, Pergamon.

WILLIAMS R.O. (1961). *The stored energy in deformed copper: the effect of grain size and silver content*. Acta Metall, vol. 9, pp 949–957.

YAGUCHI HIROSHI ET MARGOLIN HAROLD (1981). *A mechanism for the effect of grain size on yield strength*. Scripta Metall, vol. 15, pp 449–452.

YAO Z. ET WAGONER R.H. (1993). *Active Slip in Aluminium Multicrystals*. Acta metall. mater., vol. 41, pp 451–468.

ZBIB HUSSEIN M., RHEE MOONO, ET HIRTH JOHN P. (1998). *On plastic deformation and the dynamics of 3D dislocations*. Int J Mech Sci, vol. 40 n° 2-3, pp 113–127.

ZEHETBAUER M., UNGÁR T., KRAL R., BORBÉLY A., SCHAFLER E., ORTNER B., AMENITSCH H., ET BERNSTORFF S. (1999). *Scanning X–Ray diffraction peak profile analysis in deformed Cu–polycrystals by synchrotron radiation*. Acta mater, vol. 47 n° 3, pp 1053–1061.

ZISMAN A.A. ET RYBIN V.V. (1998). *Mesoscopic stress field arising from the grain interaction in plastically deformed polycrystals*. Acta mater, vol. 46 n° 2, pp 457–464.

ZSET/ZÉBULON-8 (1999). *User Manual*. EMP/LMR/NWNM/ONERA.