



ECOLE DES MINES
DE PARIS

Collège doctoral

N° attribué par la bibliothèque

/-/ /-/ /-/ /-/ /-/ /-/ /-/ /-/ /-/ /-

THESE

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Ecole des Mines de Paris
Spécialité " Sciences et Génie des Matériaux "

présentée et soutenue publiquement par

Asmahana ZEGHADI

le 8 décembre 2005

**Effet de la morphologie tri-dimensionnelle et de la taille
de grain sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins**

Directeurs de thèse : Samuel FOREST et Anne-Françoise GOURGUES

Jury

M. Marc Geers	Université de Eindhoven	(Rapporteur)
Mme Colette Rey	Ecole Centrale Paris	(Rapporteur)
M. Olivier Bouaziz	ARCELOR Research	(Examineur)
Mme Hélène Dumontet	Université de Cergy-Pontoise	(Examineur)
M. Marc Fivel	Ecole de Physique de Grenoble	(Examineur)
M. Samuel Forest	Ecole des Mines de Paris	(Directeur de thèse)
Mme Anne-Françoise Gourgues	Ecole des Mines de Paris	(Invitée)

**Centre des Matériaux P.M. Fourt de l'Ecole des Mines de Paris,
B.P. 87, 91003 EVRY Cedex**

Remerciements

Je remercie le Professeur Hélène Dumontet, qui a eu la lourde tâche de présider ma soutenance de thèse. Je la remercie pour sa lecture soigneuse de mon mémoire, mais également son soutien et ses encouragements.

Je remercie les Professeurs Marc Geers et Colette Rey d'avoir rapporté sur ce travail, de l'intérêt qu'ils y ont accordé ainsi que de leurs précieuses remarques.

Je remercie Marc Fivel qui a accepté d'abandonner momentanément la lecture de ses passionnantes oeuvres littéraires britanniques pour se consacrer à mon mémoire de thèse, merci également pour ta gentillesse et la bonne humeur que tu distribues !

Je remercie Olivier Bouaziz pour ses précieuses idées, sa disponibilité, ses encouragements et le dynamisme dont il a toujours fait preuve. Merci pour ce partenariat avec ARCELOR Research, riche et précieux en interactions "métallurgie-mécanique".

Je remercie Jean-Pierre Trottier et Esteban Busso de m'avoir accueillie au Centre des Matériaux de l'Ecole des Mines de Paris.

Je remercie mes directeurs de thèses, Samuel Forest et Anne-Françoise Gourgues. Merci Samuel de m'avoir fait confiance, guidée, aidée, soutenue et enfin accompagnée jusqu'au bout de ce travail, avec la rigueur ... et les sourires que tu partages !

Merci Anne-Françoise pour ta grande disponibilité, tes relectures très soignées en toutes circonstances, tes conseils précieux et ta patience.

Je remercie Franck N'Guyen d'avoir accepté et réalisé avec succès son association à la première partie de ce travail.

Je remercie Valérie Mounoury, Grégory Sainte-Luce, l'équipe Val, l'équipe Cocos, les cocos et la chaleureuse équipe MM pour leur aide, soutien et bonne humeur qu'ils m'ont apportés au cours de ces trois années (oui, oui, la bonne humeur des cocos également !).

Je remercie les thésards du Centre des Matériaux, de la salle Calcul au bocal ... en passant par les nombreux couloirs et bureaux.

Petits remerciements particuliers à ceux d'entre eux qui ont le plus souffert ... Franck Alexandre, Andrey Musienko, Thomas Dick et Nikolay Osipov ... notre bureau fût formidable !

Je remercie mes parents, pour tout ... et le tout à venir ...

Je remercie tous les gens que j'aime, ma famille, mes amis, qui tous à un moment ou à un autre ont déposé un petit grain de quelque chose ...

Asmahana

Résumé

Effet de la morphologie tri-dimensionnelle et de la taille de grain sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins.

Les modèles continus de plasticité cristalline appliqués aux calculs de polycristaux métalliques sont efficaces pour voir le comportement mécanique global du polycristal, à partir des lois de comportement du monocristal. On obtient ainsi également les champs de contraintes et déformations locaux dans les grains. Ceci est rendu possible à l'aide de simulations par éléments finis sur un volume élémentaire représentatif d'agrégat et les modèles d'homogénéisation numérique.

Ces approches échouent néanmoins pour décrire les effets d'échelle, classiquement observés en métallurgie physique et dont l'archétype est l'effet de taille de grain. Un modèle de plasticité cristalline de Cosserat appliqué dans le cas du comportement élastoplastique d'aciers IF ferritiques est proposé dans ce travail. Il introduit dans sa formulation une loi de durcissement supplémentaire associé à la courbure de réseau. La simulation d'agrégats polycristallins permet de reproduire numériquement un effet analogue à la loi de Hall-Petch.

Une autre limite de la plasticité cristalline est liée à l'étape clé de validation expérimentale locale. L'information expérimentale est, en général, disponible à la surface de l'éprouvette. La géométrie des grains sous la surface est cependant inconnue. Cette information est le plus souvent introduite dans les calculs par extension des joints de grains perpendiculairement à la surface. L'écart, fréquemment observé entre les résultats du calcul et les résultats expérimentaux, peut être expliqué par l'erreur qu'introduit ce choix.

On donne ici un minorant de cette erreur en considérant plusieurs agrégats ayant la même morphologie granulaire à la surface libre mais des morphologies tridimensionnelles distinctes. En élasticité la dispersion des contraintes, en un point donné de la surface, avec différentes morphologies de grains sous-jacents est de l'ordre de 30%. En élastoplasticité la dispersion peut aisément atteindre 50% de la valeur de la contrainte, ce qui amène à considérer avec prudence l'identification d'une loi de comportement à partir des seules mesures de surface.

Abstract

Three-dimensional morphology and grain size effect on the mechanical behaviour of polycrystalline aggregates.

The continuum crystal plasticity models are efficient in metallic polycrystal computations, in order to estimate the overall mechanical behaviour of the polycrystal, from the constitutive behaviour of the single crystal. Local stress and strain fields in the grains are thus obtained, using finite element simulations over a Representative Volume Element and numerical homogenization schemes. Nevertheless, those approaches fail in describing the scaling effects, which are classically observed in physical metallurgy such as the grain size effect (Hall and Petch relationship).

A Cosserat polycrystal model applied to elastoplastic ferritic IF steels is proposed in this work. It introduces an additional hardening law, which is induced by the incipient crystal lattice curvature. Simulation of tensile elongation of polycrystalline aggregate of various average grain size leads to Hall and Petch type relationships.

Another limitation of the crystal plasticity models addresses the key stage of the local experimental validation. Experimental information such as strain field measurements is usually available at the surface of the specimen only. The geometry of the grains beneath the surface is unknown. A bamboo structure is generally assumed in the computations by a simple extension of the 2D mesh with respect to the normal to the specimen surface. The differences, which are frequently obtained between computation predictions and experimental results, can partly be explained by the error introduced by this specific assumption.

We propose to give a quantitative assessment of the bias introduced in the estimation of the surface stress-strain, by the incomplete knowledge of the 3D grain morphology below a given surface with fixed grain morphology and crystal orientation at that surface. To this aim, a large scale computational and statistical approach is developed, considering several polycrystalline copper aggregates with the same granular morphology at the free surface but different three-dimensional grain morphologies.

In the case of the anisotropic elastic behaviour of the grains, fluctuations ranging between 5% and 60% are found in the equivalent stress level at a given material point of the observed surface from one realization of the microstructure to another. In the case of elastoplastic copper grains, higher fluctuations of more than 40% and reaching 60% are observed. Considering only one special realization introduces a bias in the detection of the regions of high stress levels. Considering only a columnar microstructure leads to an underestimation of stress gradients.

Table des matières

Introduction	v
partie A Impact of the tridimensional grain morphology on the mechanical behaviour of surface grains	1
I Introduction	3
II Morphology and computation tools	7
II.1 Representation of the microstructure	7
II.1.1 Original algorithm for the construction of the synthetic aggregates	7
II.1.2 Obtained morphology	7
II.2 Computational tools	9
II.2.1 Finite element meshing	9
II.2.2 Parallel computing	10
II.3 Ensemble averaging and dispersion	11
III Anisotropic elastic behaviour	13
III.1 Anisotropic elasticity	13
III.2 Boundary conditions	13
III.3 Random surface grain orientations	14
III.4 Influence of finite element mesh density and mesh type	14
III.5 Number of grains in the thickness	14
III.6 3D environment effect	16
III.6.1 Stress-strain heterogeneities	17
III.6.2 Ensemble averages	22
IV Elastoplastic behaviour	25
IV.1 Crystal plasticity model	25
IV.2 Results	27
IV.2.1 Plastic strain-stress heterogeneities	27
IV.2.2 Ensemble averages	30
IV.3 Lattice rotation fields	30
IV.4 Number of active slip systems	31
V Conclusions and outlook	35

partie B	Effets d'échelle en plasticité cristalline	37
VI	Effets de taille en métallurgie physique et modèles continus à longueur interne	39
VI.1	Eléments de métallurgie physique en plasticité cristalline	39
VI.1.1	Durcissement d'Orowan	40
VI.1.2	Durcissement Hall-Petch	40
VI.1.3	Empilements de dislocations	41
VI.1.4	Interaction entre dislocations	41
VI.1.5	Le joint de grain comme source de dislocations	41
VI.1.6	Interprétation de la loi de Hall-Petch	41
VI.2	Densités de dislocations	42
VI.2.1	Densités de dislocations statistiques	42
VI.2.2	Densité de dislocations d'accommodation géométrique	44
VI.2.3	Courbure de réseau	45
VI.3	Modèles de plasticité continue à longueur interne	45
VI.3.1	Extensions du modèle de plasticité cristalline basées sur le milieu de Cauchy	46
VI.3.2	Modèle de Cosserat du monocristal	50
VI.3.3	Modèle du second gradient du monocristal	51
VI.3.4	Modèles à gradients de variables internes	53
VI.3.5	Choix du modèle	54
VII	Le modèle de Cosserat du monocristal	57
VII.1	Cinématique et équations de bilan	57
VII.1.1	Cinématique	57
VII.1.2	Quantité de mouvement et moment cinétique	58
VII.2	Lois de comportement élastoplastique	58
VII.2.1	Hyperélasticité	59
VII.2.2	Plasticité cristalline de Cosserat	59
VII.2.3	Lois d'écroissage	60
VII.3	Signification physique et indications sur la détermination des paramètres du modèle	61
VII.3.1	Signification de la microrotation de Cosserat	61
VII.3.2	Longueur interne liée à l'élasticité de Cosserat	62
VII.3.3	Paramètres liés à la viscoplasticité généralisée	63
VII.3.4	Module d'écroissage supplémentaire dû à la courbure du réseau	63
VII.3.5	Bilan	64
VII.4	Illustration de l'effet de taille de grain prévu par le modèle de Cosserat	65
VII.4.1	Homogénéisation périodique des milieux de Cosserat	65
VII.4.2	Présentation des calculs par éléments finis 2D	66
VII.4.3	Résultats	67
VIII	Application aux aciers ferritiques	73
VIII.1	Présentation du matériau	73
VIII.2	Identification des paramètres	75
VIII.2.1	Paramètres de la plasticité cristalline classique	75
VIII.2.2	Paramètres de l'écroissage dus à la courbure	77
VIII.3	Prévision de l'effet de taille de grain	77
VIII.3.1	Résultats et comparaison avec les résultats expérimentaux	79

VIII.3.2 Diagramme de Hall-Petch	80
IX Conclusions et perspectives	83
A Notations	87
A.1 Tenseurs	87
A.2 Notations de Voigt	88
B Construction of synthetic tridimensional microstructures	89
C Macroscopic behaviour curves	99
D Matrice d'interaction des systèmes de glissement	101

Introduction

Le développement permanent de nouveaux produits dans le secteur de l'industrie des métaux conduit à des études approfondies, notamment dans le domaine de la mécanique des matériaux. La contribution de la recherche dans le domaine de la métallurgie ne se limite pas à la caractérisation pure et simple de matériaux existants. L'objectif est multiple. Il s'agit :

- de caractériser le comportement des aciers existants, à partir de lois mathématiques pour reproduire les mesures et observations expérimentales ;
- de développer ensuite des modèles physiques liant structure et propriétés ;
- et enfin d'utiliser ces modèles dans le cadre d'études de matériaux complexes non encore explorés expérimentalement.

Ces éléments fournissent donc un vaste champ de développement dans lequel on peut inscrire également les problèmes liés à l'optimisation des aciers à haute performance. Les microstructures étudiées sont de plus en plus complexes et les modèles développés s'attachent à en prédire les spécificités physiques le plus finement possible. En agissant sur les paramètres du modèle, les conditions de sollicitation ou la géométrie de l'objet, on aboutit à un véritable design de microstructure ([Cailletaud et al., 2003](#)).

Le développement de modèles et de méthodes numériques pour traiter des problèmes liés à la modélisation des matériaux métalliques fait l'objet d'une vaste étude dans la littérature. La description du comportement mécanique des métaux en général fait aussi bien appel à des modèles purement phénoménologiques, qu'à des modèles d'homogénéisation ou encore à des modèles par éléments finis. La particularité de chacune de ces différentes approches repose sur l'échelle de représentation qu'elles introduisent. Dans les polycristaux métalliques c'est à l'échelle du grain (ou de la phase) que le calcul par la méthode des éléments finis s'attache à décrire le comportement du matériau.

La puissance actuelle offerte par le calcul numérique permet d'introduire dans les modèles des mécanismes et processus physiques de plus en plus complexes. L'approche par éléments finis a été très souvent exploitée avec succès, dans le cas de configurations complexes et pour une gamme d'échelles très étendue. La modélisation permet alors d'accéder à un nombre considérable d'informations, qui ne sont pas toujours facilement accessibles expérimentalement. Ainsi, quand il s'agit d'accéder aux champs de contrainte ou de déformation à l'intérieur d'une microstructure, l'expérience s'avère une démarche longue et fastidieuse. C'est un inconvénient majeur qui n'existe pas dans la modélisation. C'est donc un outil prédictif efficace, qui apparaît comme une solution de substitution performante aux études expérimentales coûteuses voire parfois impossibles.

La modélisation fixe toutes les données entrantes d'un problème et donne accès à

toutes les données résultantes. Certaines simplifications, liées à des insuffisances sur les données entrantes introduisent des hypothèses abusives dans les calculs qui conduisent nécessairement à des incertitudes. C'est une démarche d'étude, basée sur la quantification de ce type d'erreur, qui est, entre autre, proposée dans ce travail. Pour un matériau réel, l'information expérimentale est généralement disponible à la surface de l'éprouvette (champs de déplacement, géométrie et orientation des grains..). A partir de cette description, l'analyse est effectuée pour en déduire les informations propres à la caractérisation du matériau métallique. En général, la forme des grains débouchant en surface est inconnue. Dans les calculs, c'est une donnée qui est le plus souvent obtenue par extrapolation des joints de grains, perpendiculairement à la surface. Ce choix volontaire introduit évidemment une incertitude dans les résultats du calcul, ce qui peut être à l'origine de l'écart entre les résultats issus du calcul et les résultats expérimentaux. L'objectif d'une partie de ce travail est donc de quantifier l'effet de la morphologie granulaire tridimensionnelle sur le comportement mécanique en surface.

Le second objectif de ce travail consiste à considérer des lois directement issues de la métallurgie physique et de les exploiter dans le cadre du travail du mécanicien. La mécanique des milieux continus hétérogènes est insuffisante pour prédire l'influence de la taille de grain sur le comportement mécanique. L'approche classique n'introduit pas, dans sa formulation, un paramètre de longueur interne que ce soit sous une forme implicite ou explicite. De nombreuses familles de modèles, issus de la littérature, tentent de reproduire les observations physiques liées aux effets d'échelle. C'est le cas de l'un des modèle issu de la mécanique des milieux continus et auquel nous nous intéressons dans ce travail : le modèle de Cosserat. Il permet de prendre en compte dans la modélisation certains effets d'échelles observés expérimentalement dans les matériaux métalliques en introduisant une grandeur qui est directement reliée à un paramètre physique. La démarche est validée au niveau global (via les courbes contrainte-déformation pour des aciers IF à différentes tailles de grain). Elle pourra également être validée ultérieurement au niveau local (par des comparaisons de champs de déformation et de rotation de réseau à la surface des éprouvettes) en utilisant les résultats obtenus dans la première étude.

Ce mémoire est partagé en deux parties. La première partie propose d'apporter un réponse quantitative à une étape indispensable à toute validation expérimentale locale c'est-à-dire quantifier l'effet de la morphologie granulaire tri-dimensionnelle sur le comportement mécanique en surface. Les outils nécessaires à la réalisation et à l'exploitation des résultats obtenus dans cette étude sont présentés dans le premier chapitre. On y propose une méthode originale de construction d'agrégat à morphologie de surface imposée. Les joints de grains ainsi que l'orientation des grains sur la surface sont identiques, mais la géométrie tri-dimensionnelle des grains est différente en profondeur. On justifie l'utilisation de maillages par éléments finis réguliers ainsi que l'utilisation du calcul parallèle. L'analyse statistique des réponses des nombreux calculs nécessite également une explication rigoureuse et détaillée des différentes notations utilisées. Le second chapitre est l'étude de résultats de simulations d'essais de traction réalisés à partir de plusieurs réalisations d'agrégats en élasticité anisotrope. La même démarche est appliquée dans le chapitre 3 dans la cadre de la plasticité cristalline classique où les différences significatives observées pour les champs locaux sont discutées.

La seconde partie propose de prédire l'influence de la taille de la microstructure sur le comportement mécanique des polycristaux. On se place dans le cadre de la mécanique des milieux continus généralisés. La démarche s'appuie sur des notions de métallurgie physique à savoir les densités de dislocations d'accommodation géométrique. On présente dans un premier chapitre les mécanismes physiques mis en jeu dans les phénomènes liés aux effets

d'échelle, ainsi qu'une revue bibliographique consacrée aux modèles de plasticité continue à longueur interne qui permettent de rendre compte de ces effets. On situe ainsi le modèle choisi dans ce travail dans une gamme relativement étendue de travaux, depuis les théories les plus simples jusqu'aux plus élaborées et récentes. Dans le second chapitre, le modèle de plasticité cristalline de Cosserat est présenté dans le détail. Chaque paramètre intervenant dans la formulation est ainsi explicité et son effet sur les grandeurs directement observables est illustré par des simulations bi-dimensionnelles simples. Le troisième chapitre porte sur l'application du modèle de plasticité cristalline de Cosserat à la prédiction du comportement mécanique d'aciers IF ferritiques. On a choisi ce type d'acier parce que l'on dispose de résultats sur une large gamme de taille de grains allant de $5\mu\text{m}$ à $120\mu\text{m}$. On utilise pour cela des données expérimentales sur la caractérisation mécanique et microstructurale des aciers IF. On discute enfin les possibilités et les limitations du milieu continu généralisé proposé.

La première partie du manuscrit est rédigée en anglais car elle constitue un projet d'article en préparation. La deuxième partie est en français.

Première partie

**Impact of the tridimensional grain
morphology on the mechanical
behaviour of surface grains**

Chapitre -I-

Introduction

Crystal plasticity theory has been successful in describing various aspects of metal plasticity. For this purpose, the use of the finite element in crystalline plasticity is a powerful tool, which contribute to the numerical study of materials with increasing levels of details and precision. The finite element technique takes into account several ingredients as the geometry of the tested sample, the mesh density, the boundary conditions, the constitutive law, the finite or large deformation framework, the material... This paper focuses on the first one, namely, the geometry of the specimen numerically tested. Several polycrystal geometries can be found in the literature :

- the 2D aggregates : this is certainly the most simple aggregate to create but also the most simplified one. Many finite element simulations of realistic microstructures were limited to 2D models ([Harren and Asaro, 1989](#); [Kalidindi et al., 1992](#)).
- the quasi-3D aggregates : it is a flat polycrystal with grain boundaries perpendicular to the specimen surface. 3D meshes are then built by means of simple extrusion of the surface of the specimen. The quasi-3D polycrystal has been first named the multicrystal in ([Miyamoto, 1972](#)).
- 3D aggregates : A realistic synthetic aggregate is constructed using some advanced numerical simulations as for example :
 - the Monte-Carlo grain growth algorithm used in ([Sarma et al., 1998](#)) helps to construct the morphological complexity of a realistic 3D aggregate,
 - or the Voronoi polyhedra model ([Gilbert, 1962](#)), which is also widely used to generate real-like polycrystals ([Barbe et al., 2001](#)).

Some attempts have also been made to simulate the behaviour of a real 3D sample of brass in ([Hashimoto and Margolin, 1983](#)), aluminum in ([Becker and Panchanadeeswaran, 1995](#); [Bhattacharyya et al., 2001](#)), copper in ([Teodosiu et al., 1993](#); [Delaire et al., 2000](#); [Musienko, 2005](#)) or IF steels in ([Errieau and Rey, 2004](#)). The 3D geometry is obtained from serial sectioning (several layers of the sample are successively removed by an electropolishing process and an OIM analysis is made after each removal). Comparisons can then be drawn between accurate strain fields measurements and their simulated counterparts. However, the method is destructive and labour consuming.

Many finite element simulations using crystal plasticity aim directly at describing the polycrystal behaviour in order to check the validity of a model or to quantify the model parameters. It is then necessary to match the simulations with real experiments. It was successfully done in several investigations proposed in literature. Crystalline plasticity

simulations can then be consistent with the overall experimental stress-strain curve as shown in (Hoc et al., 2001) for a quasi-3D interstitial free titanium steel polycrystal deformed by uniaxial tension. In (Thibaux et al., 2000), an accurate prediction of the macroscopic properties of a two-phase aggregate is obtained. Extended to the prediction of the evolution of texture during plastic deformation (Mika and Dawson, 1999; Becker, 1991), it is a key issue for many industrial metal forming processes. Overall, the major features of the evolved texture in a variety of deformation paths is captured, both as location and intensity levels of various components (Sarma and Dawson, 1996; Kalidindi et al., 1992; Becker, 1991). For some authors it is also used to describe the heterogeneous local strain and rotation fields. (Becker and Panchanadeswaran, 1995) compared the grain rotations experimentally measured by Panchanadeswaran during deformation with the corresponding predictions from both a Taylor type model and from a finite element model incorporating crystal plasticity theory. Lattice rotations are studied in (Takahashi et al., 1994) in plastic deformation of an FCC metal. In (Harren and Asaro, 1989), the heterogeneity of the deformation field of the polycrystal under tension, compression and simple shear is studied. The results (heterogeneous deformation and localised shearing) show in particular the influence of grain interactions. Besides, finite element simulations using crystal plasticity allow a deeper insight in the mechanism that control the local deformation of metals. (Errieau and Rey, 2004) obtained an accurate description of the grain splitting phenomenon, simulating an IF steel aggregate deformed under plane strain compression. Typical properties of the latent hardening behaviour of polycrystal simulations in (Harder, 1999) are in good agreement with experimental findings. Crystal plasticity coupled with finite element method is also used for further verification of model assumptions. In (Harren and Asaro, 1989), a quantitative assessment of the Taylor model validity is made by comparing finite element results to the Taylor model analogues. It allows also investigators to reveal features that would otherwise be difficult or impossible to obtain in laboratory. Indeed, the results of simulations provide estimations of non directly measurable quantities such as dislocation densities or amount of slip which contribute to the analysis of experimental data (Hoc et al., 2001). Good agreement is found in (Eberl et al., 2002) and (Havlicek et al., 1990), between numerical and experimental observations of the slip lines, which appear at the sample surface.

Although the finite element predictions are fairly consistent with experimental measurements for many of the investigated deformation paths, the agreement fails with regard to some predictions. Finite element simulations of (Bhattacharyya et al., 2001) predict larger in-grain misorientations than experimental observations do. In (Delaire et al., 2000) measured orientations are more dispersed in experimental observations than those expected by the simulations. In (Eberl et al., 2002), the model underestimates the rotation of the crystallographic lattice. The differences observed in a qualitative or quantitative analysis may be accounted for by different hypotheses. The obvious one is the error due to the measurements (Parisot et al., 2000; Mohamed et al., 1997). The mesh refinement is also a discussed argument utilized by many authors (Delaire et al., 2000; Kalidindi et al., 1992; Becker, 1991). One of the limitations of the experiment conducted by (Panchanadeswaran et al., 1996) encourages to study 3D microstructures. (Becker and Richmond, 1994) first suggest that it could be essential to consider 3D microstructural geometry in accurate predictions of crystallographic orientation, strain localization and fracture. In (Becker and Panchanadeswaran, 1995), the discrepancies obtained for some grains were attributed to inappropriate boundary conditions : the 3D grains structure was not taken into account. They conclude to the necessity to use 3D meshes, to get a correct description. (Bhattacharyya et al., 2001) propose that the results bring out the need for more physics in the constitutive model, to capture the important features of the morphology of deformation. It is then necessary to conduct 3D analysis. The solutions may be affected by the 2D nature of the model. The interactions with material

below are neglected and discrepancies obtained with the simulations may be due to the specific environment beneath the surface (Hoc et al., 2003).

Obtaining the real 3D geometry of a sample is not always possible. That is why alternative construction methods of realistic aggregates are necessary. The construction of 3D ideal aggregates for a given surface grain morphology is usually obtained by the extrusion of grain boundaries perpendicularly to the surface. This choice obviously introduces a bias in the computation results. Simulation results may be affected by this simplifying assumption. The objective of this work is to quantify the influence of the grain morphology on the surface fields by means of an original method. For that purpose, a synthetic image of the granular surface is generated. We start from a given picture of surface grain morphology obtained by EBSD (Electron Back Scattering Diffraction) analysis or by numerical simulation. This geometrical information is then numerically and randomly extrapolated into the thickness. Several 3D synthetic aggregates have been obtained that have the same surface microstructure but different grain morphology below the surface. The orientations of the grains and grain boundaries at the surface are the same but the geometrical environment is different underneath the reference surface. We performed tensile test simulations using several realizations of the synthetic aggregates. We studied the influence of the mesh refinement and the influence of the number of grains in the thickness. They allow us to choose a mesh size and to limit the thickness of the aggregates to 3 grains in the third direction. In the following, the influence of the granular environment was studied by conducting computations on different realizations, first in anisotropic elasticity and second in elastoplastic conditions. The resulting observations are discussed in the last part.

Chapitre -II-

Morphology and computation tools

II.1 Representation of the microstructure

The construction of the aggregates is based on the Voronoi polyhedra model (Gilbert, 1962). This approach is widely used in material science to represent real like polycrystals (Barbe et al., 2001; Lebensohn et al., 2005). The method is based on the space division by Voronoi polyhedra. They were formally defined as "zones of influence" of a particular set of points (Decker and Jeulin, 2000). Let $D \subset R^2(R^3)$ to be a real domain, and $E = A_i$ a set of N random points, so that $A_i \in D$. Let also $d(P_1, P_2)$ to be an euclidean distance between any points P_1 and P_2 . The influence zone zi of the center A_i can then be defined as :

$$zi(A_i) = \{P \in D \mid d(P, A_i) < d(P, A_j) \forall j \neq i\}$$

The polyhedra centers can be distributed in space, following any random law. In this work, the method uses a repulsion distance. This allows to control a minimum size of the grains and to obtain a regular grain size distribution.

II.1.1 Original algorithm for the construction of the synthetic aggregates

The construction of the aggregates is decomposed into 3 main stages :

- the first one is the generation of the first layer of grains of the volume, which includes the reference surface ;
- the second stage is the classical realization of a Voronoi polyhedra aggregate ;
- and the third stage lies in the combination of the two previous volumes.

The detailed description of the construction process is proposed in annexe B.

II.1.2 Obtained morphology

An example of two 3D particular realizations is shown in figure C.1, using the original construction technique previously described. The surface (x,y) is the same for the two realizations. The aggregate has been cut into two separated parts in order to show the different grain environment in the third direction inside it. Several differences can be noticed :

- the shape of the surface grains is very different in the third direction. See for instance grain 18 which is large in figure C.1-(a) and small in figure C.1-(b).

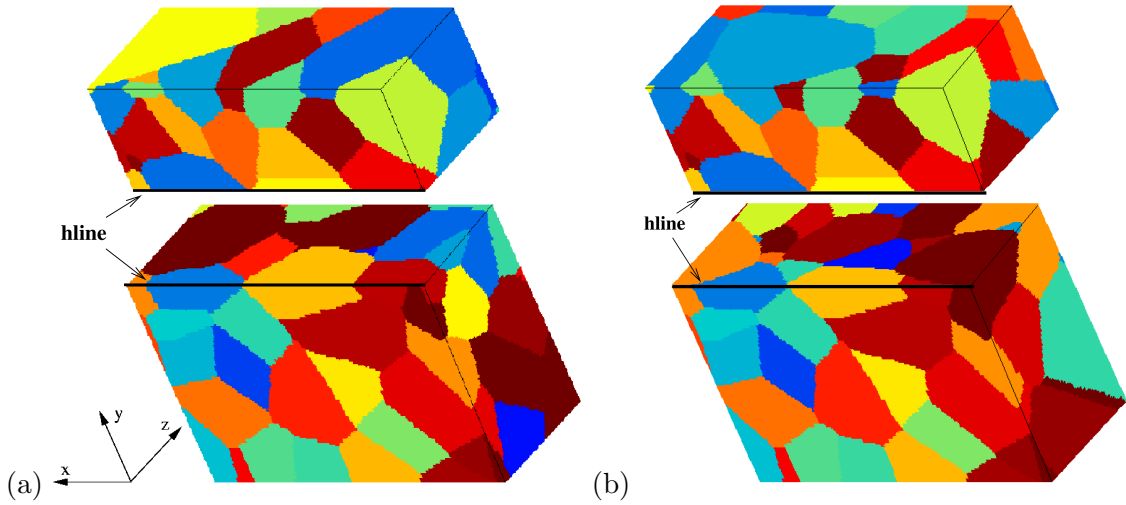


Fig. II.1 – Two 3D Voronoi mosaic model realizations. The reference surface in (x,y) plane is the same. The structural environments in the third direction (z) are different from (a) to (b).

- the angle of the grain boundaries with the line hline are significantly different. See grain 16, which makes a right angle with the line hline in figure C.1-(a) and makes a angle equal to 45 degrees with the line hline in figure C.1-(b).

Figure II.2 underlines the previous characteristics. It shows for four realizations the (x,z)

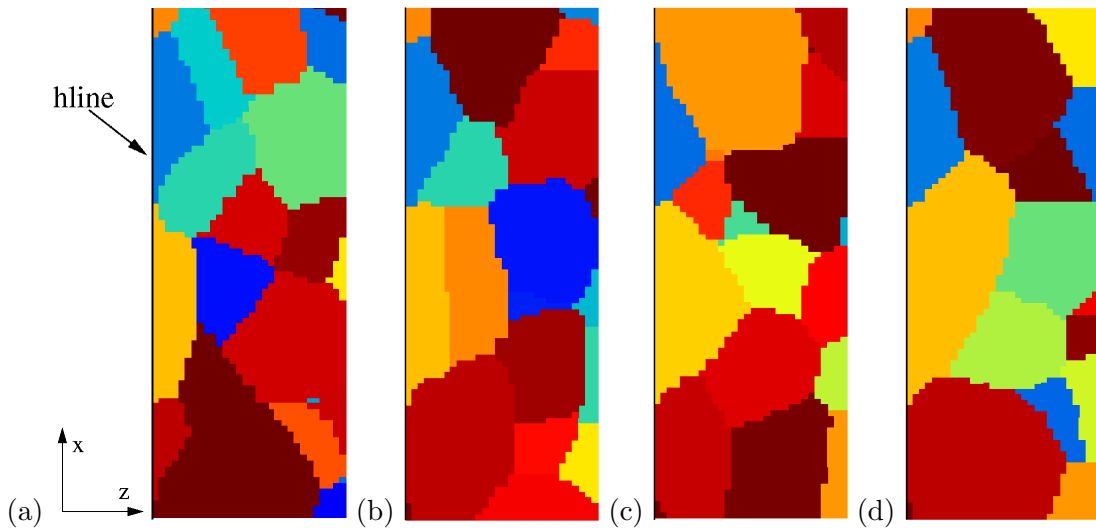


Fig. II.2 – Four different 3D realizations of aggregates with the same reference surface in plane (x,y) (on the left of each image) : top view of the cross-section in (x,z) plane at the position referenced hline. The shape of the grains is very different from one realization to another, even in the first layer.

sections inside the aggregate and previously seen in figure C.1. Line "hline" is materialized by a black line on the left hand side of each view (see figure II.3). The grains shown on the left, from the bottom to the top are then grains 19, 15, 18, 17 and 16. The grain boundaries at the surface are exactly the same but the shape of the grains in the direction z is very different from one realization to another. For instance see the yellow grain (grain 18) which

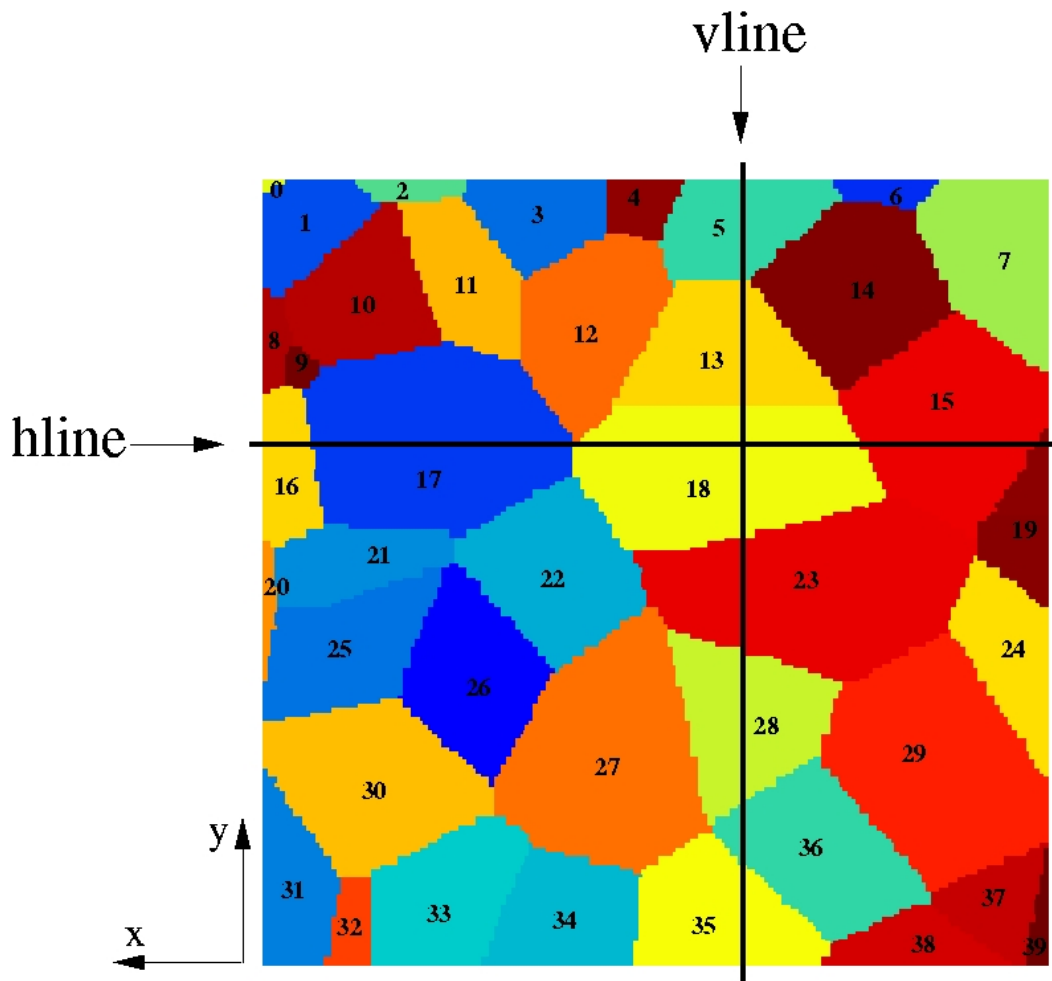


Fig. II.3 – 3D Voronoi mosaic model based realization : image of the microstructure of the reference surface identical for all realizations in plane (x,y) .

has four different shapes and in relation with the line hline, it has very different angles. The dimensions of the different volumes are the same.

The same average grain size is fixed in all realizations (see in figure II.4). The dispersion in the average grain size varies from 1 to 1.3.

II.2 Computational tools

II.2.1 Finite element meshing

After obtaining several binary images of the microstructure using the original technique previously described in section B.7, a multiphase element technique is used to superpose the finite element mesh on the image of the microstructure. This technique was initially proposed in (Lippmann et al., 1997) and extensively used for aggregate computations (Barbe et al., 2001). Each integration point of the finite element mesh is linked to its corresponding position in the image, so that one finite element can be shared by several grains. The same crystallographic orientation is attributed to all integration points inside a given grain. The multiphase element technique has been discussed compared to the free mesh technique (Diard,

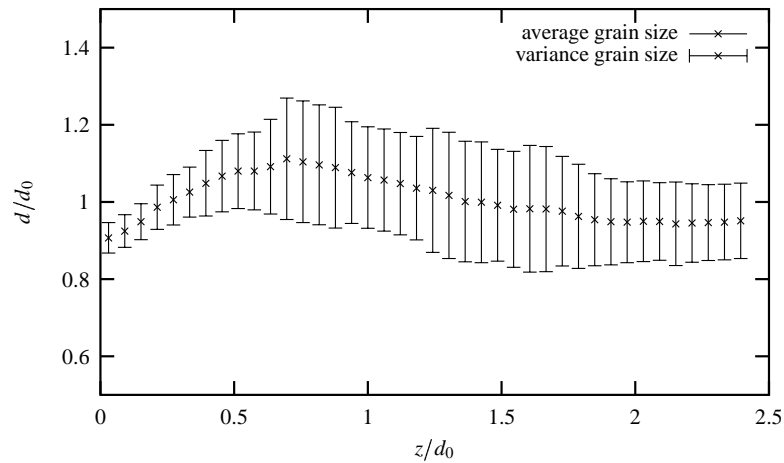


Fig. II.4 – Variance and average grain size calculated for 18 aggregate realizations. d is the grain size (in a given realization and for a given layer), d_0 is the mean grain size calculated over all realizations and z is the position along the z -axis ($z = 0$ is the surface where the grain morphology is imposed).

2001). The later one describes exactly the grain interfaces whereas this is not the case for the former one. However, it has been shown in (Diard, 2001) that for sufficiently fine mesh (28*28*28 elements with 100 grains), the finite element response with both techniques are close to another. An example of an aggregate mesh using the multiphase element technique is shown on the figure II.5-(a).

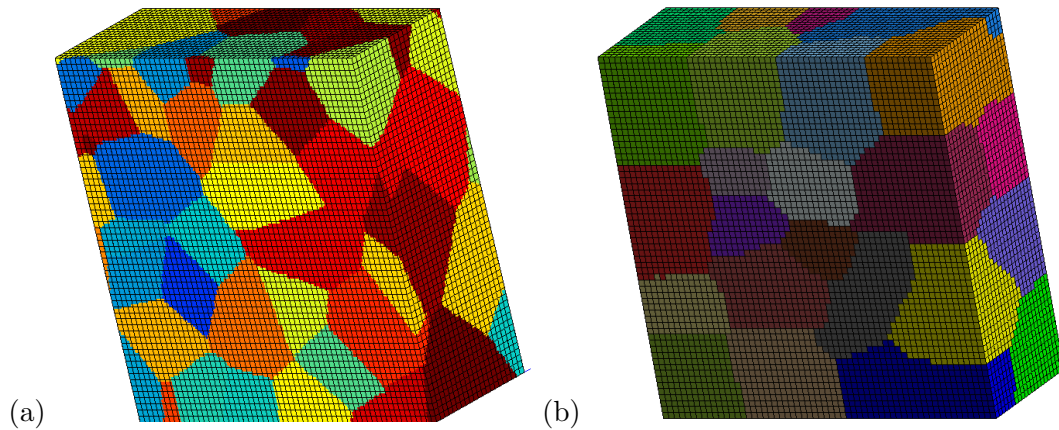


Fig. II.5 – (a) Random distribution of 88 grains in 3D space with a reference fixed surface. Images of the granular microstructure are superimposed on the finite element mesh. (b) subdivision of the microstructure into 30 sub-domains for parallel computing.

II.2.2 Parallel computing

The numerical cost of the computations presented in this work is very high. The parallel version of the finite element code ZéBuLoN is presented in (ZSeT/ZéBuLoN, 1999; Feyel et al., 1997; Feyel, 1998). The problem is solved with the FETI method (Finite Element Tearing and Interconnecting method) (Fahrat and Roux, 1994). The parallelisation scheme is based on a domain decomposition algorithm. The finite element mesh is thus decomposed into several

domains (see for instance the decomposition into thirty sub-domains in figure II.5-(b)). Each sub-problem is solved independently within a subdomain of the mesh. An additional interface problem is solved. It ensures the compatibility of the displacement between the subdomains. The data exchange between the different tasks uses a PVM communication protocol. A cluster of 34 computers has been used in this work for the largest computation. It corresponds to twenty-nine Go memory needed to solve the largest problem.

II.3 Ensemble averaging and dispersion

In this subsection, average and variance operators are defined, that will be applied to strain and stress fields. A limited domain V in the physical space is considered. The volume average operator $\langle \cdot \rangle$ over the volume V is defined as

$$\langle f \rangle = \frac{1}{V} \int_V f dV \quad \text{for each field } f \text{ defined over } V \quad (\text{II.1})$$

When applied to the stress field component σ_{22} , the application of the average volume operator gives, for a given volume V :

$$\langle \sigma_{22} \rangle = \Sigma_{22} = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{22} dV \quad (\text{II.2})$$

The ensemble averaging operator $\bar{\cdot}$ for N realizations of a microstructure is given by :

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^i \quad (\text{II.3})$$

Where f^i is the value of f for the i^{th} realization. The value f can be the von Mises equivalent stress σ_{eq} (where $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2}\varrho^d}$: ϱ^d with σ^d the stress tensor deviator) at a given point \mathbf{x} of each realization.

$$\bar{\sigma}_{eq}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_{eq}^i(\mathbf{x}) \quad (\text{II.4})$$

Ensemble averaging can be applied to the volume averaged quantities such as the global stress component Σ_{22} :

$$\bar{\Sigma}_{22} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Sigma_{22}^i \quad \text{with} \quad \Sigma_{22}^i = \langle \sigma_{22} \rangle_{V_i} \quad (\text{II.5})$$

We denote as $D^2(f)$ the variance of a random variable f , which is the random variable distribution dispersion around its mean value e.g. :

$$D^2(\sigma_{eq}(\mathbf{x})) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma_{eq}^i(\mathbf{x}) - \bar{\sigma}_{eq}(\mathbf{x}))^2 \quad (\text{II.6})$$

The relative dispersion is defined as the ratio between the dispersion and the ensemble average of the quantity :

$$\epsilon_{\sigma_{eq}(\mathbf{x})} = \frac{D(\sigma_{eq}(\mathbf{x}))}{\bar{\sigma}_{eq}(\mathbf{x})} \quad (\text{II.7})$$

Chapitre -III-

Anisotropic elastic behaviour

III.1 Anisotropic elasticity

Properties of copper single crystals exhibit cubic symmetry. The elasticity constants of pure copper are taken from (Méric et al., 1994). We use classical Hooke's law $\underline{\sigma} = \underline{\underline{\mathbf{C}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}$. For our case, in Voigt notation, the stiffness constants are :

$$C_{11} = 159 \text{ GPa} \quad C_{12} = 122 \text{ GPa} \quad C_{44} = 81 \text{ GPa}$$

In case of a matrix with cubic symmetry, the anisotropic index a is given by :

$$a = \frac{2 C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (\text{III.1})$$

For copper the anisotropy factor is then equal to 4.34. It is rather high (in the isotropic case, this factor is equal to 1). The estimations for the elastic moduli, K and μ , respectively the bulk modulus and the shear modulus are :

$$\begin{aligned} K_{Voigt} &= K_{Reuss} = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} = 134000 \text{ MPa} \\ \mu_{Voigt} &= \frac{2C' + 3C_{44}}{5} = 56000 \text{ MPa} \quad \text{with} \quad C' = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \\ \mu_{Reuss} &= \frac{5C'C_{44}}{2C_{44} + 3C'} = 34000 \text{ MPa} \end{aligned}$$

III.2 Boundary conditions

Tensile simulations were performed. The following boundary conditions are prescribed in the computations :

- the bottom end of the specimen (see figure II.5 and figure III.1) is fixed in the $\underline{\mathbf{y}}$ direction as $u_y = 0$,

- a homogeneous displacement u_{22} is imposed to the upper part of the specimen,
- the node at the origin is fixed in the three directions as $u_x = u_y = u_z = 0$, in order to avoid rigid body movements,
- the displacement of a node located in the \underline{x} axis is fixed in the \underline{z} direction in order to avoid the rigid body rotations of the specimen,
- and lateral surfaces were free.

III.3 Random surface grain orientations

The same crystallographic orientation is randomly attributed to all integration points inside a given grain. Table III.3 give the crystallographic orientations of the grains at the reference surface.

III.4 Influence of finite element mesh density and mesh type

The finite element mesh size must be sufficiently small to ensure the convergence of the results. For this purpose, the effect of mesh refinement is studied for one particular 3D morphology (realization) with 52 grains. The number of grains and the geometry of the microstructure were fixed and the microstructure reference surface is shown in figure III.3. Ten different mesh densities were tested. The number of degrees of freedom (number of nodes multiplied by three) varies from 53847 for the coarsest mesh up to 1741833 for the finest one. An example of two meshes tested is shown in figure III.1. The characteristics of the different mesh resolutions studied are shown in table III.2. The elastic material properties were given in the previous subsection. The ten aggregates were submitted to a tensile test with boundary conditions given in subsection III.2. The results given in figure III.2 show the convergence of the apparent Young's modulus defined as $E_{app} = \frac{\Sigma_{22}}{\langle \varepsilon_{22} \rangle}$, as a function of the number of degrees of freedom. It shows that one must use about 500 quadratic elements per grain to get an accuracy equal to 0.2%. The maps of the equivalent stress fields at the reference surface are given in figure III.1 for two mesh sizes. A slight difference between both local responses is observed. Indeed, the pattern becomes finer, when the mesh size decreases. The local response depends on the size of the mesh in the range of investigated mesh size. This effect is depicted in figure III.3-b, which gives the evolution of the local von Mises equivalent stress along the integration points of a straight line going from a lateral side to the other on the reference surface. Considering these observations, using the mesh size referenced 52 – 60 corresponds to an acceptable precision-cost computational ratio.

III.5 Number of grains in the thickness

In order to check the influence of the number of grains in the thickness on the von Mises equivalent stress fields at a given surface, several tensile test simulations of one given microstructure with three different thicknesses were performed :

- one grain in the thickness, 60*60*7 quadratic elements, i.e. 343125 d.o.f.
- two grains in the thickness, 60*60*14 quadratic elements, i.e. 653127 d.o.f.
- three grains in the thickness, 60*60*21 quadratic elements, i.e. 963129 d.o.f.

grain number	ϕ_1	Φ	ϕ_2
1	278.4728	85.9285	180.2960
2	35.0313	112.4407	49.0551
3	210.1579	57.0619	311.9345
4	352.8895	120.1797	231.6329
5	358.2946	118.3213	285.3302
6	244.3496	60.1484	315.9132
7	53.3256	138.3003	244.5561
8	73.7731	31.7455	70.7748
9	344.0733	58.7911	28.8080
10	296.0155	117.9986	98.8634
11	160.7658	81.7500	268.5441
12	118.3699	52.3860	60.9670
13	260.9910	18.1481	45.7785
14	179.6914	135.6014	271.9244
15	120.1800	48.2094	73.9172
16	174.4946	65.5103	95.4242
17	185.2679	74.5589	44.5585
18	225.6780	39.9233	162.7938
19	58.5136	85.6776	246.2527
20	117.1658	94.5149	230.7428
21	95.1020	130.9545	97.3608
22	152.8924	66.2794	49.9243
23	124.4605	63.4235	250.5173
24	251.9731	31.7025	141.8329
25	110.1034	46.7320	254.0610
26	261.8049	121.8982	286.0197
27	317.2601	116.3611	355.1857
28	193.2092	67.4034	43.1983
29	223.4200	77.1559	53.9018
30	210.8897	52.4585	240.5333
31	214.7783	77.7252	108.2109
32	152.5150	72.2109	272.4120
33	116.1142	85.4847	130.6964
34	12.6940	118.5270	76.8653
35	279.7722	135.2556	314.3150
36	160.1671	35.1694	261.4701
37	0.1799	90.0338	253.9525
38	8.0377	110.2626	301.7984
39	342.7771	133.0468	252.8802

Tab. III.1 – Orientations of the grains at the reference surface : the grains are randomly oriented and the same orientations of the grains at the reference surface is taken for all computations.

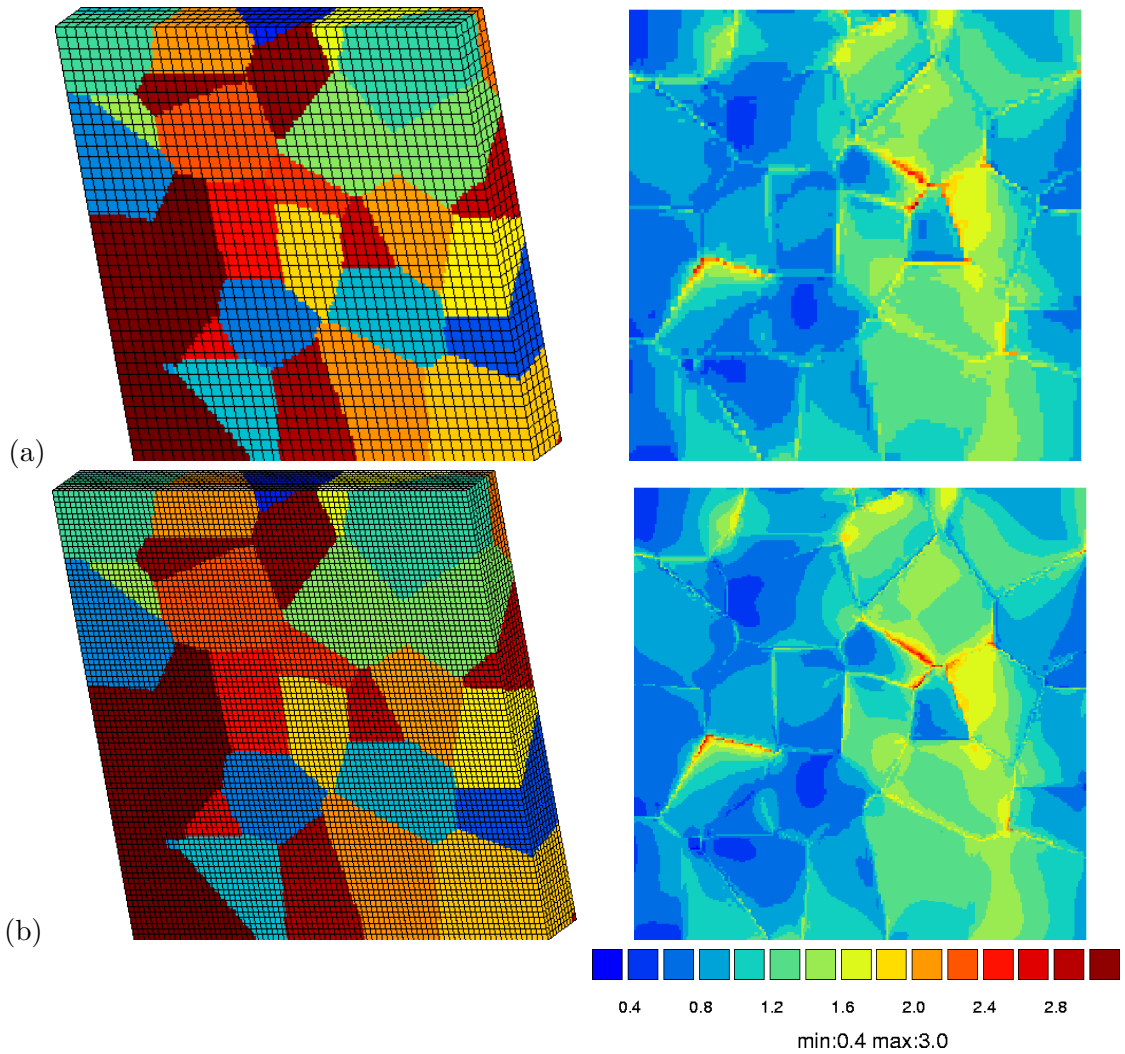


Fig. III.1 – Finite element simulations of the tensile test of 3D aggregates : the same aggregate realization is used. The mesh is a regular array of quadrilateral elements with for (a) 8000 elements (114513 d.o.f.) and for (b) 64000 elements (841023 d.o.f.). The corresponding von Mises equivalent stress fields maps (normalized by the global mean stress) are shown on the right.

The reference surface of the microstructure is shown in figure III.3-(a). The number of elements is kept small enough for the computation to be performed on a reasonable number of workstations in parallel computing. Figure III.4 shows the comparison of the local response for the three computations. The von Mises equivalent stresses were plotted along the integration points of a straight line going from a lateral side to the other at the reference surface. The results are only slightly sensitive to the number of grains in the thickness. However, we will limit in the following to three grains in the thickness.

III.6 3D environment effect

The sensitivity of the local response at the surface of the sample to the 3D geometry of the grains beneath is checked in this subsection. Eighteen microstructures have been

mesh	# of nodes	# of elements	# of d.o.f.	# of sub-domains
52-30	17949	3600	53847	1
52-40	38171	8000	114513	1
52-50	69513	15000	208539	8
52-60	114375	25200	343125	12
52-64	146705	32768	440115	16
52-70	175157	39200	525471	16
52-72	206371	46656	619113	18
52-80	280341	64000	841023	20
52-90	387023	89100	1161069	28
52-102	580611	135252	1741833	34

Tab. III.2 – Mesh types (number of grains-number of elements along the x or y direction), number of nodes, total number of elements and degrees of freedom in the volume and number of sub-domains used in order to study the influence of mesh refinement.

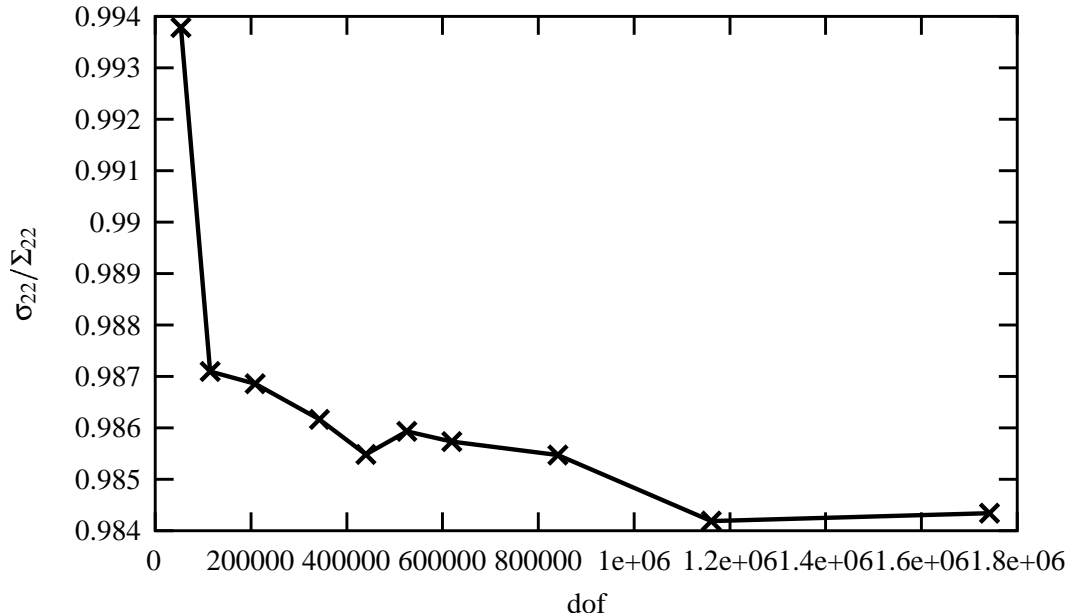


Fig. III.2 – Global effect of the mesh size on the value of apparent Young's modulus.

subjected to tensile loading with the same imposed average strain. The mesh size and the thickness of the aggregate have been determined in sections III.4 and III.5. Each aggregate has the same reference surface including the grain orientations, but a different geometric and crystallographic environment conditions beneath the reference surface. The computations have been carried out up to 2% macroscopic strain.

III.6.1 Stress-strain heterogeneities

Typical maps of von Mises stress obtained on the reference surface for five different realizations are shown in figure III.5. The realization results shown in figure III.5-(e) will be particularly analysed. It corresponds to the response of the 3D mesh with columnar grains. Overall, 15 grains have stress levels larger than 0.5 (10 grains in figure III.5-(a) and 21 grains in figure III.5-(e)). Grain 28, for example has a stress level equal to 0.5 in figure III.5-(d)

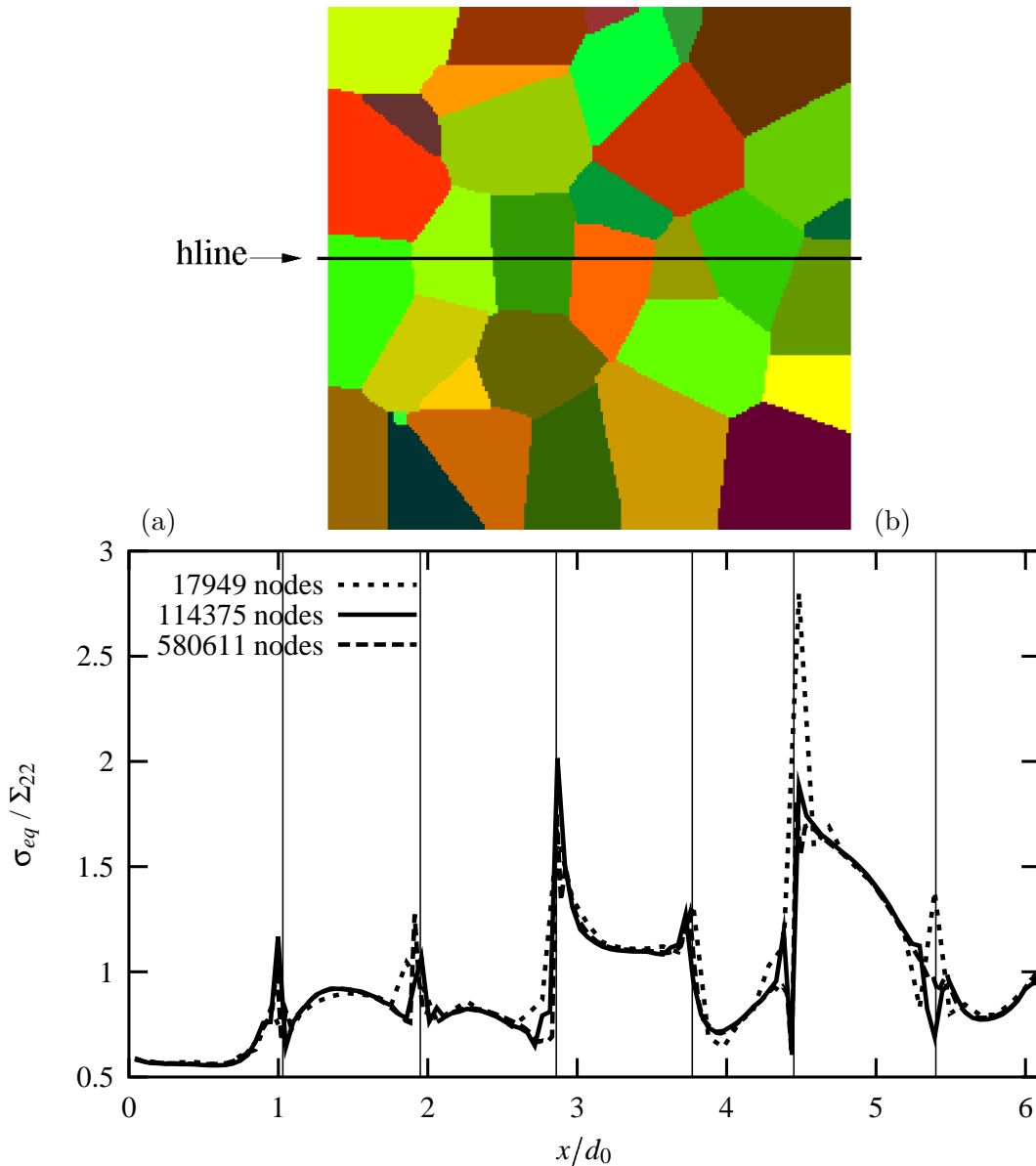


Fig. III.3 – (a) Reference surface used for the influence of the mesh density study and for the influence of the number of grains in the thickness study (b) effect of the mesh density on the local von Mises equivalent stress response normalized by the global mean stress plotted along hline. x is the position along the x-axis and d_0 is the mean grain size calculated over all realizations. The vertical lines indicate the x-positions of the grain boundary intersections.

and this level increases from realization III.5-(b), III.5-(a) and III.5-(c). For all realizations, distribution of equivalent stress reveals the grain boundaries as shown previously in (Quilici and Cailletaud, 1999). Indeed, von Mises stress is always maximum near the grain boundaries. This is particularly observed in the central area, at the interface between grains 18, 22, 27, 28 and 23, where the maximal value of the stress is reached (value equal or larger than 2.3) except in figure III.5-(d), where this characteristic is not seen. However, the stresses observed at one grain boundary are not at the same level in all the realizations. Indeed, if grain 28 in figure III.5-(d) has a stress level equal to 1.5 near the grain boundaries, this level increase until 2.3 in the response shown in III.5-(c). The same observation can be done for the bottom

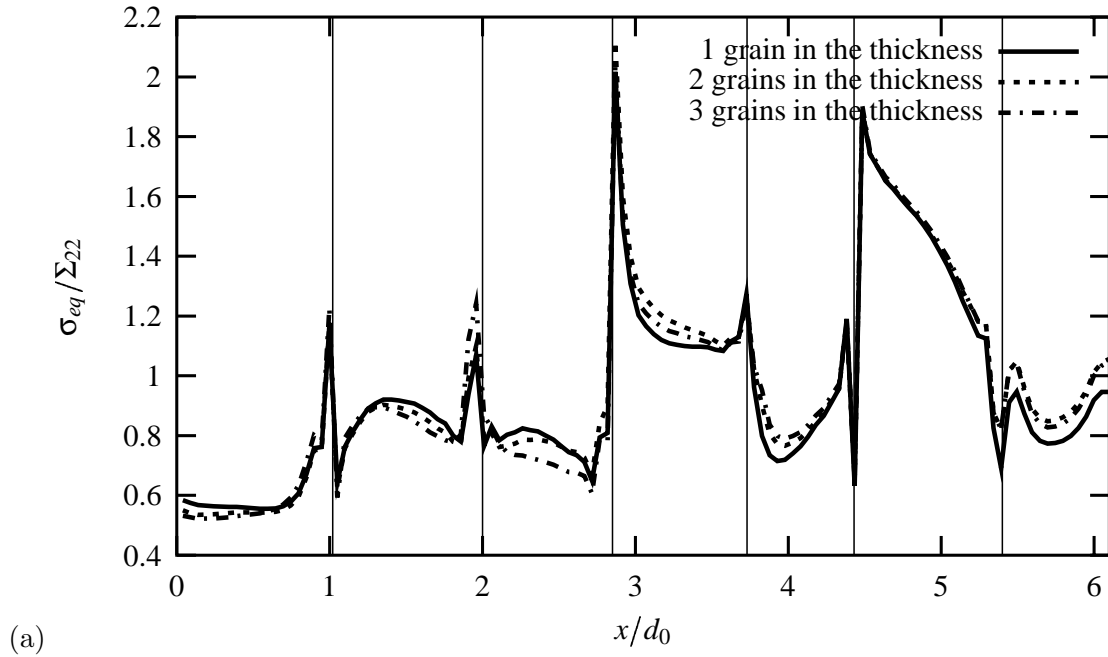


Fig. III.4 – Effect of the average number of grains in the thickness on the local von Mises equivalent stress response normalized by the global mean stress plotted along hline. x is the position along the x-axis and d_0 is the mean grain size calculated over all realizations. The vertical lines indicate the x-position of the grain boundary intersections.

right corner grain boundary in grain 23 between figure III.5-(a) and figure III.5-(b).

Not only the boundaries of the grains are affected, but the differences from one realization to another are also observed in the core of the grains. The distribution of the equivalent stress is very inhomogeneous. Several stress levels are observed in each individual grain. For example, a characteristic distribution in level lines is observed in grain 29 in figure III.5-(a), or in grain 18 of figure III.5-(b). In figure III.5-(b), the response of grain 29 scans all stress levels from 0.5 to 2.3 (from top to bottom). This stress gradient is seen in all realizations even if the scheme of stress distribution is quite different inside the grain. This is also observed for grain 22 in figures III.5-(b) and -(c), from the left hand side to the right hand side but in this case, the stress distribution scheme is quite the same for all realizations. In figure III.5-(e), which corresponds to the realization with columnar grains, grain 22 shows the same stress distribution as previously seen in figure III.5-(b). However, the contrast between stress levels is not so sharp. In this particular realization and compared with the others, the stress distribution is smoothed, minimal and maximal values are less visible as shown in figure III.5-(e). The maximal stresses band in the central area is finer around grain boundaries when compared to others realizations response.

The difference in the behaviour within grains of several particular realizations is then emphasised when considering the local stress paths. This strong effect is also captured in figure III.6. The evolution of the von Mises equivalent stress field at integration points along a straight line going from a lateral side to the other, along hline in figure III.6-(a), and along vline in figure III.6-(b) is plotted. The grain boundaries are delineated by a straight vertical line in figure. Grains 16, 17, 18, 15 and 19 are considered along hline and grains 35, 36, 28, 23, 18, 13 and 5 are considered along vline. As observed in figure III.5, discrepancies between the realizations are significant both near the grain boundaries and in the core of the grains. Indeed, in figure III.6-(a), a difference equal to 0.5 is observed in grain 17, along the line hline,

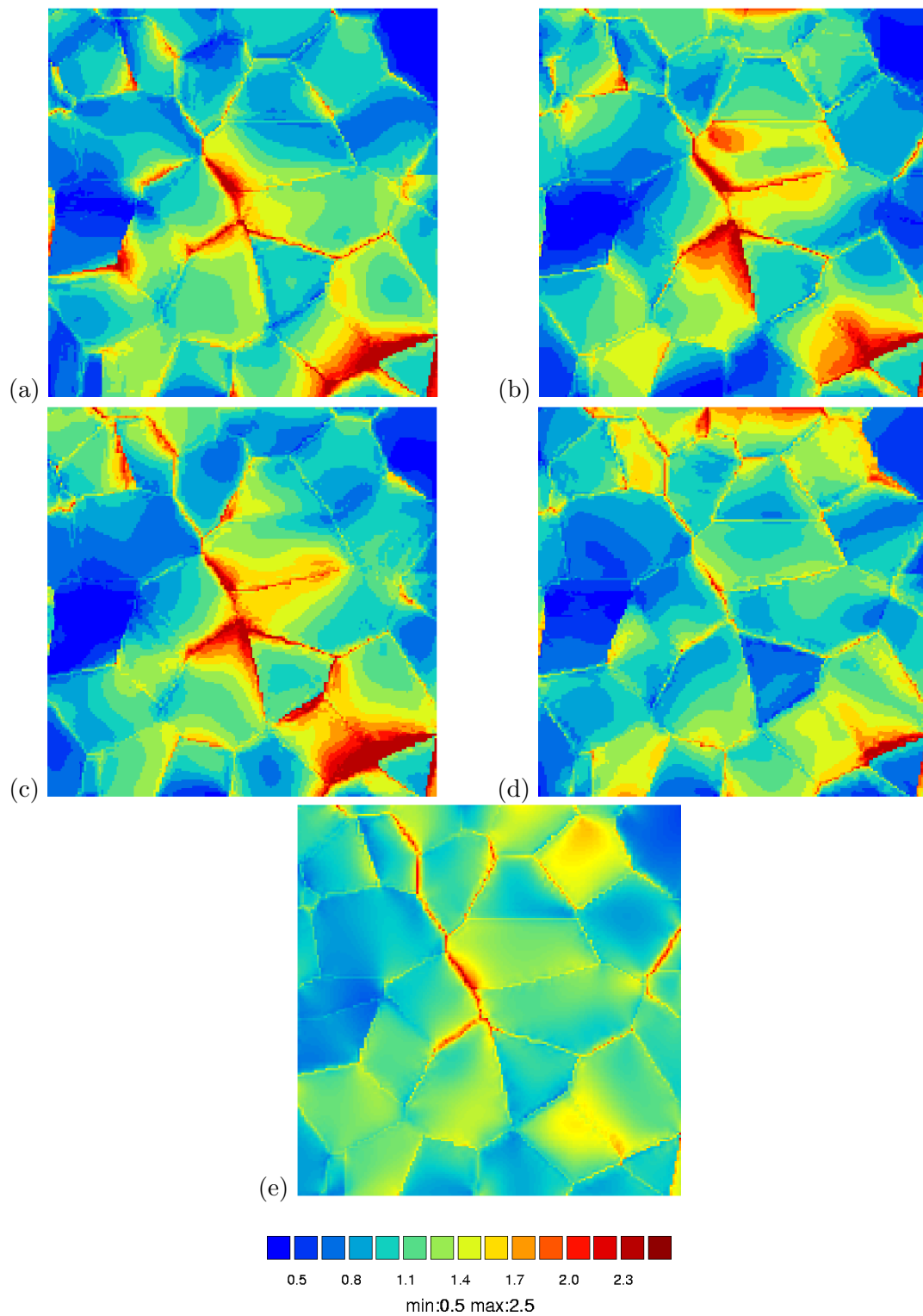


Fig. III.5 – von Mises equivalent stress distribution normalized by the global mean stress for five different 3D realizations. Figure (e) shows the result obtained for the aggregate with grain boundaries extended perpendicularly to the reference surface.

between realization 2 and realization 3 at the grain boundary. A larger difference (variation with a factor 1 to 2) can be also shown in figure III.6-(b), in the grain 18, between realization

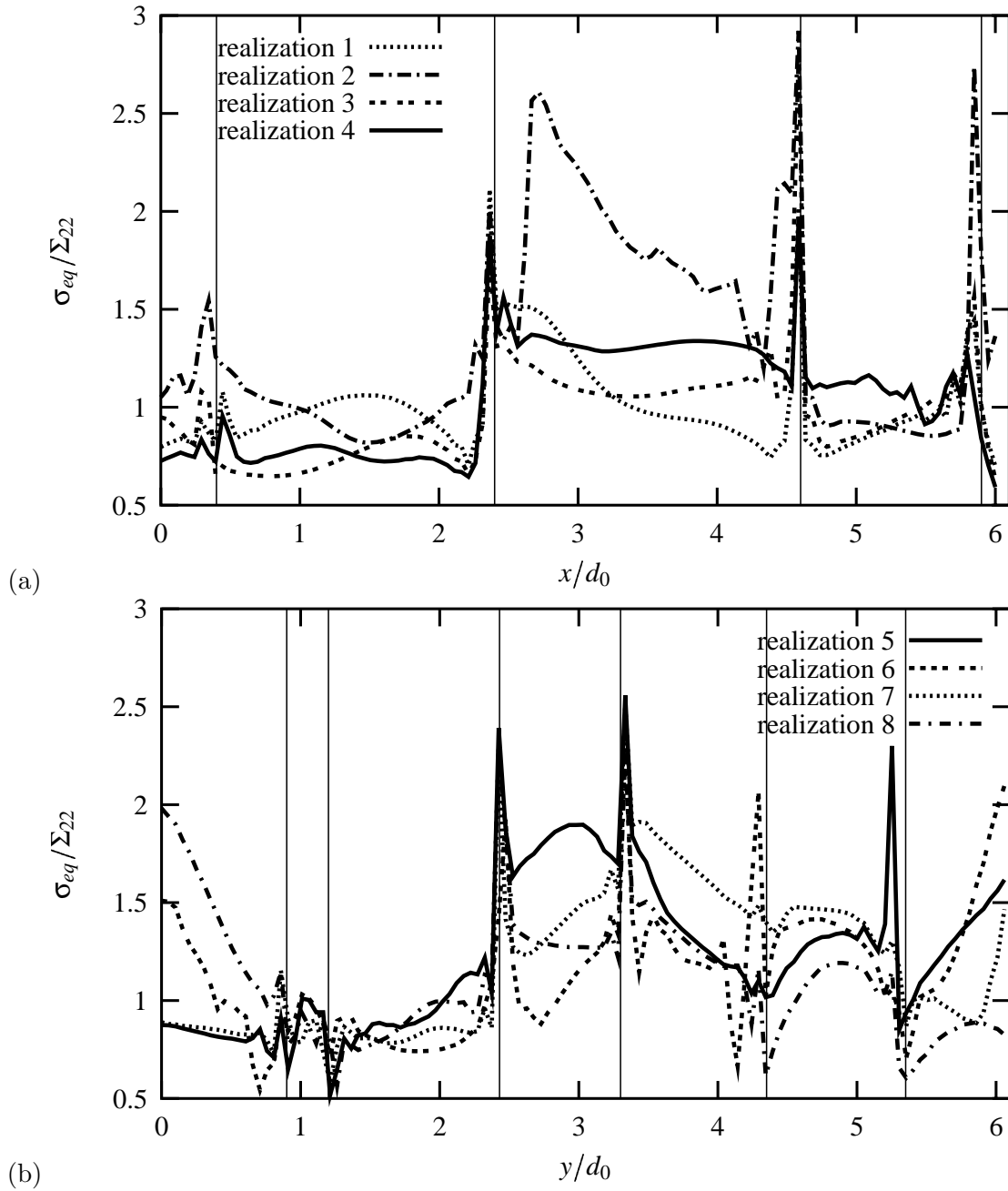


Fig. III.6 – 3D grain morphology effect on the von Mises equivalent stress response normalized by the global mean stress on the reference surface : (a) along hline, (b) along vline. x is the position along the x-axis, y is the position along the y-axis and d_0 is the mean grain size calculated over all realizations. The vertical lines indicate respectively the x-position and y-position of the grain boundary intersections.

6 and realization 7. In the core of the grains, the maximum difference along the line hline is seen in grain 18, between realization 2 and realization 1. The local stress varies within a factor from 1 to 2. An identical variation is obtained along the line vline, for grain 23, between realizations 5 and 6. A local stress state variation within a factor 1 to 2 is obtained in general.

This analysis shows that the influence of the morphology of the grains in the volume has a significant impact on the local deformation fields obtained on the reference surface in

anisotropic elasticity and for the observed quantity.

III.6.2 Ensemble averages

Here an analysis of the average response obtained for the eighteen particular 3D morphologies is proposed. The ensemble average fields of the von Mises stress response over the eighteen realizations is shown in figure III.7-(a). At each integration point, the average

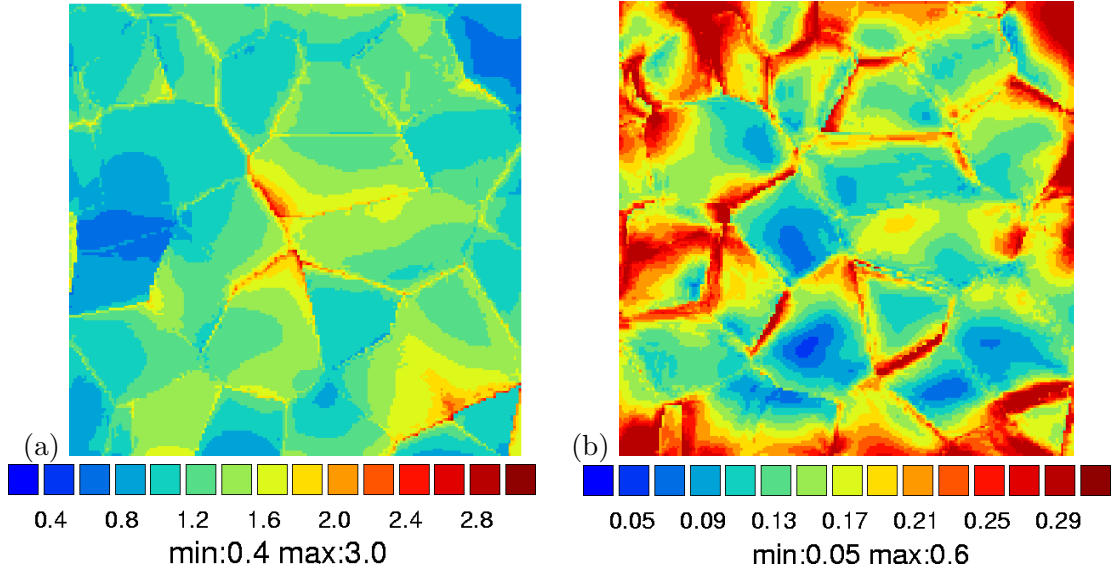


Fig. III.7 – (a) Ensemble average : for σ_{eq} the von Mises equivalent stress, Σ_{22} the global mean stress, the quantity represented here is $\bar{\sigma}_{eq}/\bar{\Sigma}_{22}$. (b) Local variance of the ensemble average : for $D(\sigma_{eq})$ the variance estimated for the von Mises equivalent stress, the quantity represented here is $D(\sigma_{eq})/\langle \bar{\sigma}_{eq} \rangle$.

value of the von Mises stress fields $\bar{\sigma}_{eq}$ normalized by the average global mean stress $\bar{\Sigma}_{22}$ is represented. Local heterogeneities are observed. As in all particular realizations results, the maximum stresses are located near the grain boundaries. The typical maximum stress concentration (equal or larger than 2.5), in the central area of the aggregate, previously observed for most realizations, is kept in the ensemble average fields in figure III.7-(a). Note that the map of the ensemble average response of the eighteen 3D particular realizations is close to the map obtained for the 3D mesh with columnar grains even if it stays less smoothed for the former one. More accurate information on the dispersion, namely, the local stress dispersion normalized by the average equivalent stress is shown in figure III.7-(b). The local variance of the results is maximum in the region of the grain boundaries. About 30% local dispersion are obtained for example near grain 28, grain 26, grain 13 or grain 15 boundaries. The dispersion is also significant in the core region of the grains. Grain 13 shows a dispersion equal to 15% in the core, in grain 14 it is equal to 17%, and it reaches 30% in grain 21. The previous remarks can be made along particular Gauss points. The evolution of the equivalent stress, normalized by the global mean stress response, along the integration point of hline is shown in figure III.8. The stress dispersion normalized is also shown along this line. As previously shown, the dispersion can be locally maximal near the grain boundaries (see e.g. grains 18 and 15 or grains 15 and 19) as well as in the grain core (e.g. grain 18) and thus in all the grains considered (grains 16, 17, 18, 15 and 19). As concluded above, the local variance of the results can be equal to 15% in some area and reaches the high value of 30% in some

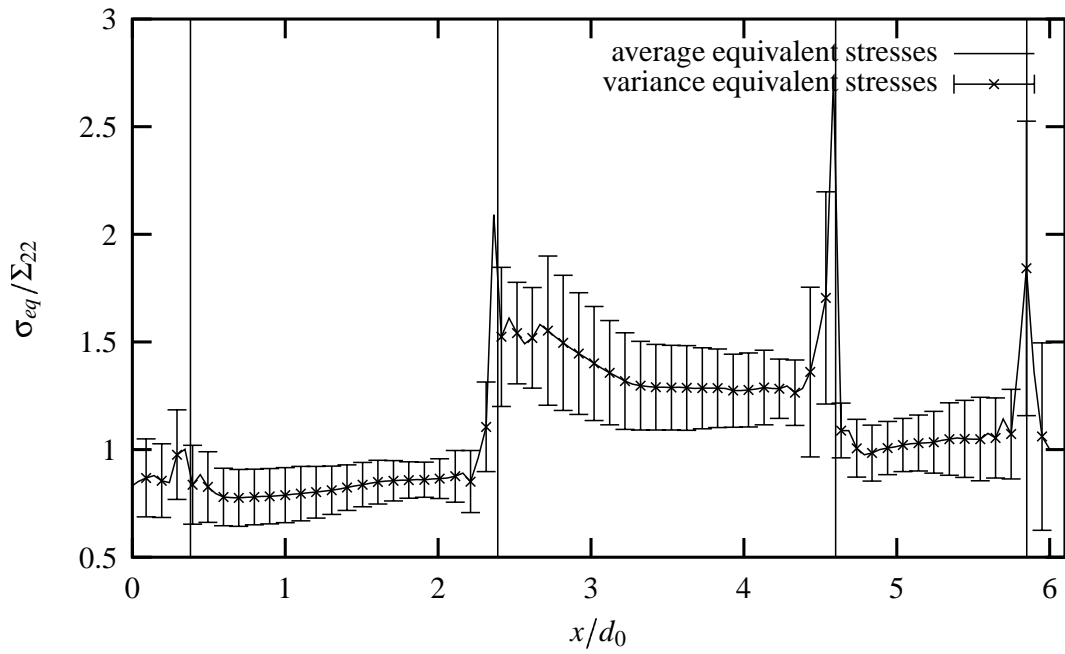


Fig. III.8 – Variance and mean value of the von Mises equivalent stress normalized by the global mean stress response, calculated on the reference surface along hline. x is the position along the x -axis and d_0 is the mean grain size calculated over all realizations. The vertical lines indicate the x -position of the grain boundary intersections.

others.

Chapitre -IV-

Elastoplastic behaviour

IV.1 Crystal plasticity model

The formulation of the model adopted in this work has been originally formulated in (Méric et al., 1991) within the small strain framework. The classical decomposition of strain rate into elastic and plastic part is adopted. Plastic strain rate is calculated from the sum of elementary slip on the crystalline slip systems. The crystallographic particularities are defined by means of the orientation tensor \mathbf{P}^s . Slip systems are geometrically defined by vectors \mathbf{n}^s and \mathbf{l}^s which are respectively the normal to the slip plane and the slip direction. Each slip rate $\dot{\gamma}^s$ depends on the resolved shear stress τ^s , following Schmid law. A phenomenological Norton-like viscoplastic flow rule is adopted. The effect of self and latent hardening is introduced by the means of an interaction matrix h_{sr} . The main equations are recalled below within the infinitesimal framework :

$$\dot{\xi} = \dot{\xi}^e + \dot{\xi}^p \quad (\text{IV.1})$$

$$\tau^s = \mathcal{Q}^g : \mathbf{P}^s = \frac{1}{2} \mathcal{Q}^g : (\mathbf{n}^s \otimes \mathbf{l}^s + \mathbf{l}^s \otimes \mathbf{n}^s) \quad (\text{IV.2})$$

$$x^s = c \alpha^s \quad ; \quad r^s = r_0 + bQ \sum_r h_{sr} q^r = r_0 + Q \sum_r h_{sr} \left\{ 1 - e^{-b v^r} \right\} \quad (\text{IV.3})$$

$$\dot{\gamma}^s = \dot{v}^s \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad ; \quad \dot{\xi}^p = \sum_s \mathbf{P}^s \dot{\gamma}^s \quad (\text{IV.4})$$

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

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d \alpha^s \dot{v}^s \quad \text{with} \quad \alpha^s(t=0) = 0 \quad ; \quad \dot{q}^s = (1 - b q^s) \dot{v}^s \quad (\text{IV.6})$$

In the present work, we want to compare lattice rotation maps obtained for several realizations. It is then necessary to include explicitly this parameter in the model. In the following, the finite-deformation crystal plasticity framework is briefly recalled. A detailed description of the large-deformation theory of single crystals model can be found for instance in (Mandel, 1971; Asaro, 1983; Teodosiu et al., 1993). Based on the introduction of an

intermediate stress-released configuration (Mandel, 1971), a multiplicative decomposition of the strain gradient is used as :

$$\underline{\mathbf{F}} = \underline{\mathbf{F}}^e \cdot \underline{\mathbf{F}}^p \quad (\text{IV.7})$$

In the intermediate configuration, the crystal orientation with respect to the laboratory axes is the same as in the initial one. The elastic part of deformation is given by :

$$\underline{\mathbf{E}} = \underline{\mathbf{S}}^e \cdot \underline{\mathbf{R}}^e \quad (\text{IV.8})$$

where $\underline{\mathbf{R}}^e$ is the rotation. It is sufficient to consider in this study a small-strain and small-rotation framework as in (Eberl et al., 2002). The advantage of this formulation is mainly the numerical efficiency because it reduces the geometrical non-linearity of the problem. A simplified formulation can then be deduced from the general crystal plasticity theory as follows. In the case of small strain and small rotations, the previous decomposition is written :

$$\underline{\mathbf{F}} = \underline{\mathbf{S}}^e \cdot \underline{\mathbf{R}}^e \cdot \underline{\mathbf{P}} \quad (\text{IV.9})$$

$$\simeq (I + \underline{\xi}^e) \cdot (I + \underline{\omega}^e) \cdot (I + \underline{\xi}^p + \underline{\omega}^p) \quad (\text{IV.10})$$

$$\simeq I + \underline{\xi}^e + \underline{\omega}^e + \underline{\xi}^p + \underline{\omega}^p \quad (\text{IV.11})$$

The velocity gradient is given by :

$$\dot{\underline{\mathbf{F}}} \cdot \underline{\mathbf{F}}^{-1} \simeq \dot{\underline{\xi}}^e + \dot{\underline{\omega}}^e + \dot{\underline{\xi}}^p + \dot{\underline{\omega}}^p = \dot{\underline{\xi}} + \dot{\underline{\omega}} \quad (\text{IV.12})$$

with $\dot{\underline{\xi}} = \dot{\underline{\xi}}^e + \dot{\underline{\xi}}^p$ and $\dot{\underline{\omega}} = \dot{\underline{\omega}}^e + \dot{\underline{\omega}}^p$. The plastic deformation and rotations are given by :

$$\dot{\underline{\xi}}^p = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s (\underline{\mathbf{n}}^s \otimes \underline{\mathbf{l}}^s + \underline{\mathbf{l}}^s \otimes \underline{\mathbf{n}}^s) \quad (\text{IV.13})$$

$$\dot{\underline{\omega}}^p = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s (\underline{\mathbf{n}}^s \otimes \underline{\mathbf{l}}^s - \underline{\mathbf{l}}^s \otimes \underline{\mathbf{n}}^s) \quad (\text{IV.14})$$

In the context of small perturbations, the *lattice rotation* is represented by the tensor ω^e . The slip plane normal $\underline{\mathbf{n}}^s$ and the slip direction $\underline{\mathbf{l}}^s$ are updated as follows :

$$\underline{\mathbf{n}}^s = \underline{\omega}^e \cdot \underline{\mathbf{n}}_0^s \quad (\text{IV.15})$$

$$\underline{\mathbf{l}}^s = \underline{\omega}^e \cdot \underline{\mathbf{l}}_0^s \quad (\text{IV.16})$$

The plasticity parameter set used in the computations is given in table IV.1 and was previously proposed in (Méric et al., 1994) except the value of r_0 which is larger in order to reduce the computation time.

$C_{11}(MPa)$	$C_{12}(MPa)$	$C_{44}(MPa)$				
159300	122000	81000				
$r_0(MPa)$	$Q(MPa)$	b	$K(MPa.s^{(1/n)})$	n	h_1	$h_i(i \neq 1)$
40.	17.	10.	2.	15.	1.	1.4

Tab. IV.1 – Coefficient values taken in the elastoplastic computations for copper and previously established in (Méric et al., 1994).

IV.2 Results

The influence of the 3D environment on the surface response in elastoplasticity is analysed. Eight copper aggregates were numerically tested in tension with the same imposed average deformation. All microstructures have the same reference surface, the same crystallographic orientations of the grains at the surface but a different 3D environment under. The computations have been carried out up to 2% macroscopic strain. In order to better catch the information about the evolution of the cumulated plastic slip inside one given grain, the grain boundary grid is overlaid on the surface response results maps.

IV.2.1 Plastic strain-stress heterogeneities

Figure IV.1 features the distribution of cumulated plastic slip on the reference surface for five realizations. Figure IV.1-(e) shows the cumulated plastic slip map obtained for the particular realization with columnar grains. Large differences are observed from one realization to another. Whereas only one grain (grain 2) has a cumulated plastic slip level quasi null in realization IV.1-(a), three grains (grains 7, 32 and 35) shows a cumulated plastic slip level quasi null in figure IV.1-(c), six grains (grains 0, 1, 2, 10, 19 and 30) in figure IV.1-(d) and nine grains (grains 2, 6, 7, 19, 24, 32, 33, 34 and 35) in figure IV.1-(b). As previously observed in (Barbe et al., 2001), in the elastoplastic case, the shape of the grains is not revealed by the evolution of the observed quantity. In contrast, the cumulated plastic slip develops like deformation bands that go across several grains as observed in (Barbe et al., 2001). Typical bands are different from one realization to another. This is the case for the 45° inclined band in the bottom right hand corner of the aggregate, which is seen in figures IV.1-(b) and -(c) but not in figures IV.1-(a) or -(d). Besides, the large plastic slip band (which goes through grains 15, 23, 28 and 27) observed in figure IV.1-(b) is not seen in figure IV.1-(a). Figure IV.1-(d) shows a more scattered band distribution than in the others realizations responses. The cumulated plastic slip map of the columnar grains realization is shown in figure IV.1-(e). The band distribution of plastic slip is observed as in the others figures. However, the distribution is very different. Indeed, a large and long band of cumulated plastic slip maxima goes through grains 5, 12, 17, 21, 25 and 30. This characteristic band is not observed in the other maps. In general, the gradient of plastic slip inside individual grains is less pronounced. More grains have a null cumulated plastic slip level, (grains 9, 31, 32, 33, 34, 35 and 29) whereas only grains 24 and 35 are in this case in figure IV.1-(b) and none in figure IV.1-(c).

The distribution of the cumulated plastic slip is strongly heterogeneous. Large differences are observed between the various results. Grain 15, for example, shows different cumulated plastic slip levels. Only 5% of the grain has a plastic slip larger than 1.5 in figure IV.1-(a) whereas 80% of the grain reaches this value in figure IV.1-(b). In figure IV.1-(d), 5% of grain 23 has a stress level larger than 1.8 whereas it represent 15% of the same grain in figure IV.1-(a), 40% in figure IV.1-(b) and 50% in figure IV.1-(c). Slip in grain 21 is quasi-homogeneous in figure IV.1-(d), with a plastic slip level larger than 2. This quasi-homogeneous cumulated plastic slip distribution is found in the same grain in figure IV.1-(c) but for a slip level equal to 0.4. These large differences in the level of the cumulated plastic slip from one realization to another are observed in large grains as well as in smaller ones.

Figure IV.2 shows the evolution for four different realizations of the cumulated plastic slip finite element response, normalized by the global mean cumulated plastic slip, along the integration points of line hline (from left hand side to right hand side) and of line vline (from bottom to top). Strong differences from one realization to another are noticed near the boundaries of the grains as well as in the core of the grains. In grain 18, along the line hline, the local response varies with a factor 1 to 4 near the grain boundaries between realizations

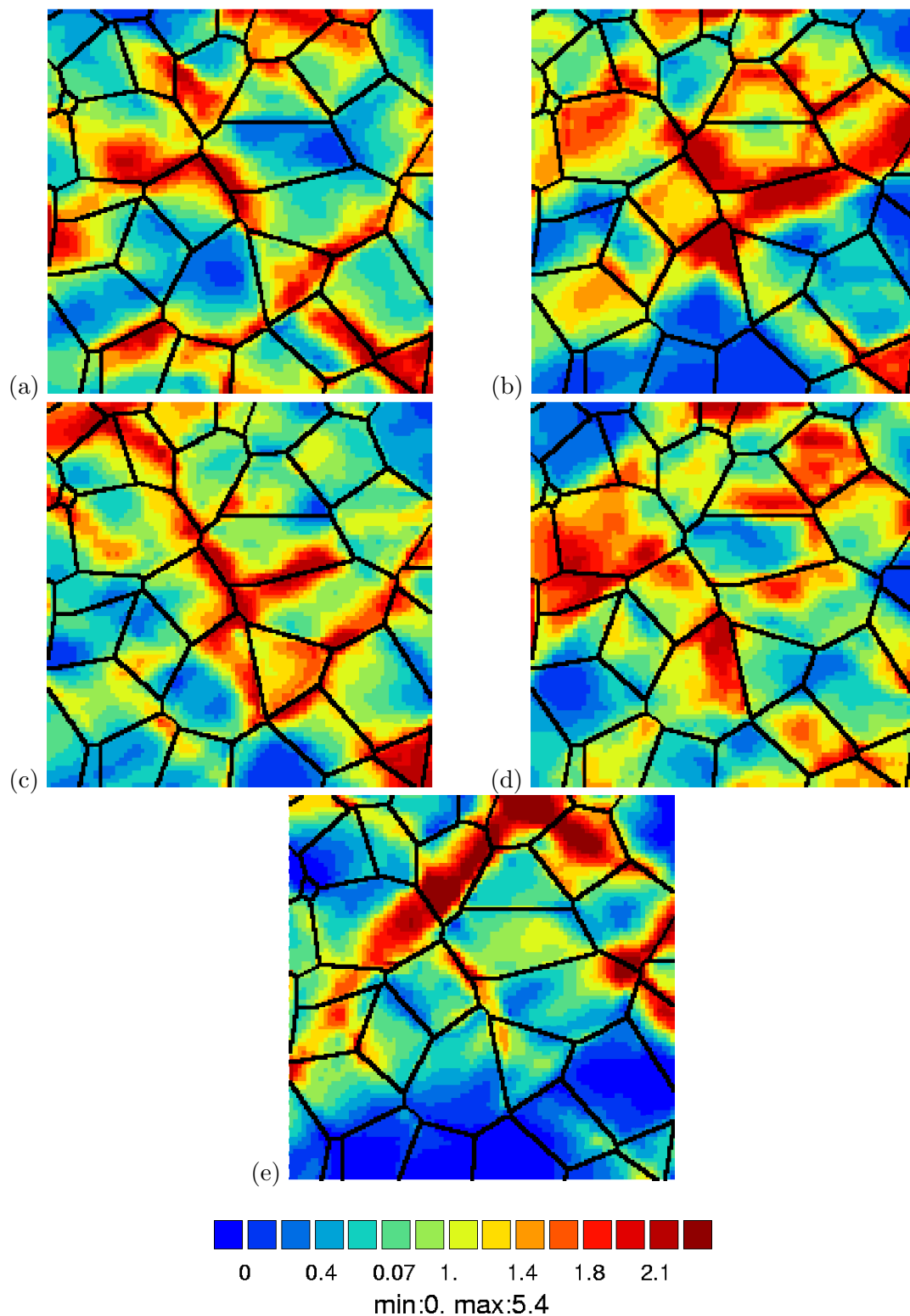


Fig. IV.1 – Cumulated plastic slip distribution γ_{eq} normalized by the global mean cumulated plastic slip $\langle \gamma_{eq} \rangle$ for four different 3D realizations.

5 and 6. This difference is less pronounced in the core of this grain (variation by a factor one to 2). In grain 15, the maximal difference (variation from 1 to 2) is obtained between

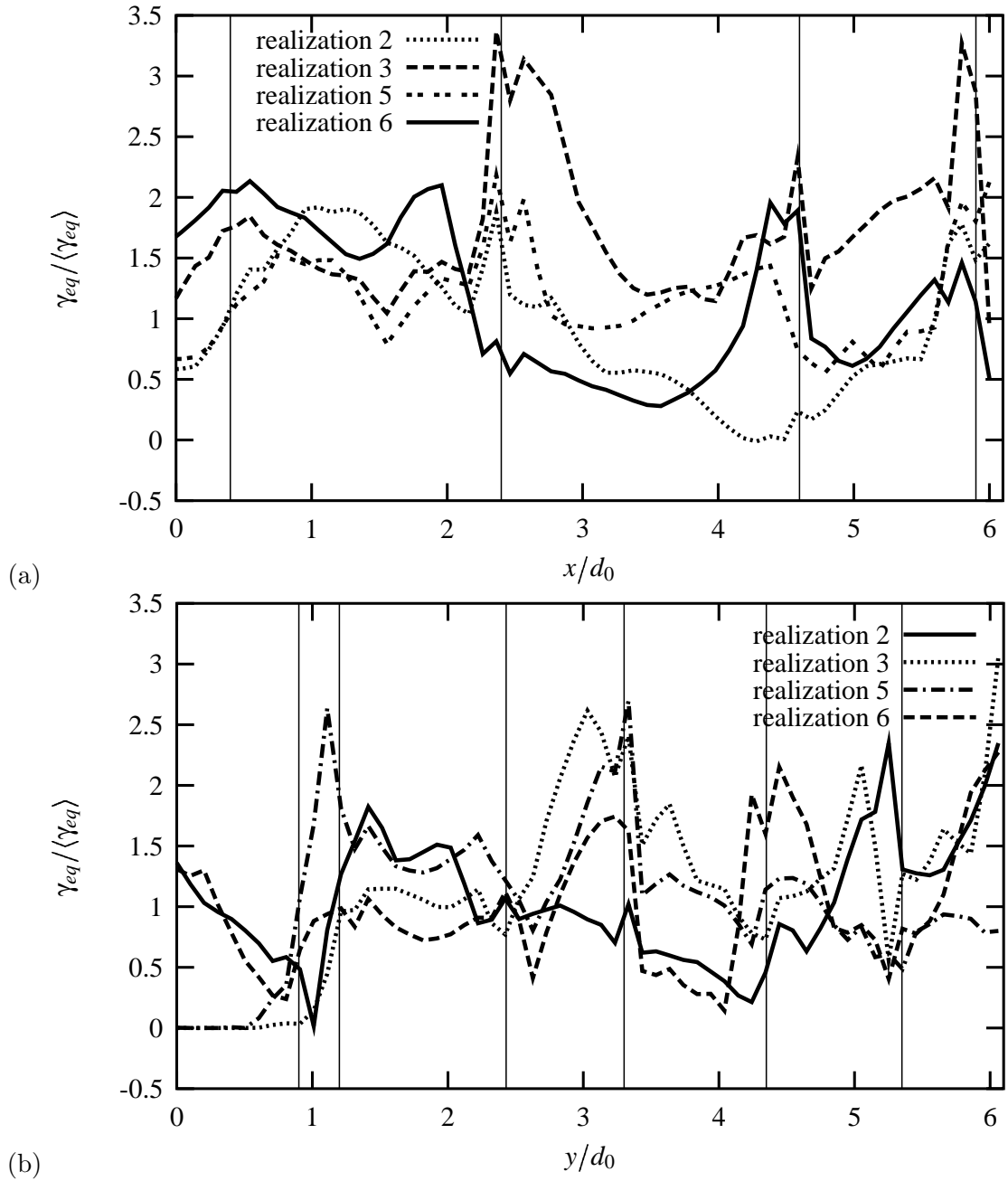


Fig. IV.2 – 3D grain morphology effect on cumulated plastic slip response, normalized by the global mean cumulated plastic slip, on the reference surface : (a) along hline, (b) along vline. x is the position along the x-axis, y is the position along the y-axis and d_0 is the mean grain size calculated over all realizations. The vertical lines indicate respectively the x-position and y-position of the grain boundary intersections.

realizations 2 and 3. In grain 23, along line vline, the same difference (variation of the response with a factor 1 to 3) is observed at the grain boundaries as well as in the grain core, between realizations 2 and 3. In grain 36, realizations 2 and 5 show a difference by a factor 1 to 4. In general, the local cumulated plastic slip state can vary by a factor of 1 to 4. A gradient of cumulated plastic slip is observed in the grains. The plastic slip profile is very undulated inside each grain.

IV.2.2 Ensemble averages

Figure IV.3-(a) is a map of ensemble average cumulated plastic slip normalized by the global average cumulated plastic slip ($\langle \gamma_{eq} \rangle / \bar{\gamma}_{eq}$) at each Gauss point. In general, 19 grains

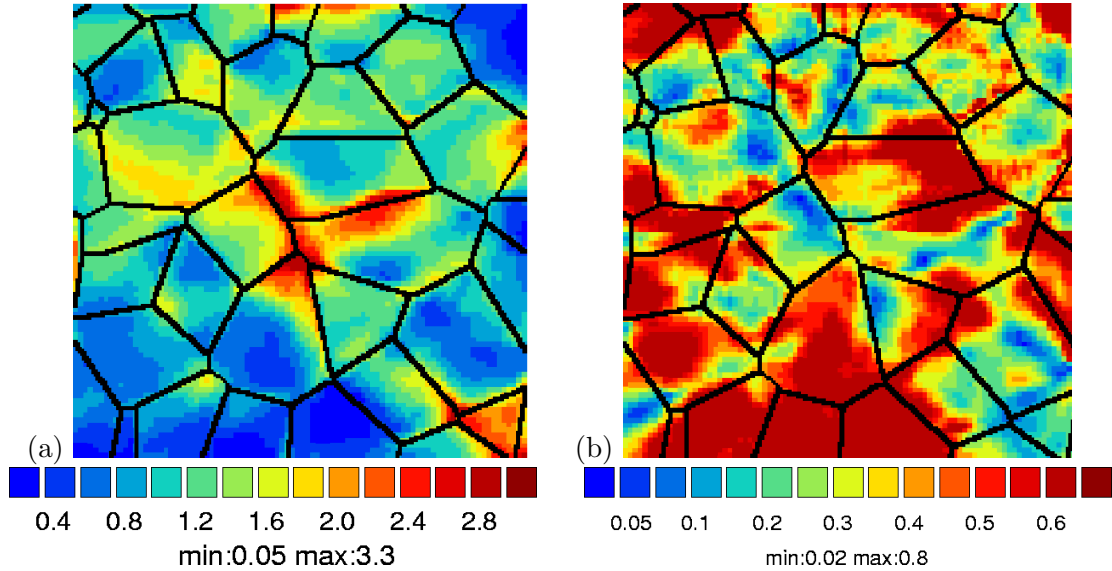


Fig. IV.3 – (a) Ensemble average : for γ_{eq} the cumulated plastic slip, the quantity represented here is $\bar{\gamma}_{eq} / \langle \bar{\gamma}_{eq} \rangle$. (b) Variance of the ensemble average : for $D(\gamma_{eq})$ the variance estimated for the cumulated plastic slip, the quantity represented here is $D(\gamma_{eq}) / \langle \bar{\gamma}_{eq} \rangle$.

are active (cumulated plastic slip level larger than 1). A strong gradient of cumulated plastic slip is observed inside individual grains. The level distribution is well seen in grains 15, 17 or 22 for example. Unlike the elastic case, the columnar grain realization results map is very different from the ensemble average map. The most interesting is the local cumulated plastic slip dispersion normalized by the global cumulated plastic slip ($D(\gamma_{eq}) / \langle \bar{\gamma}_{eq} \rangle$) shown in figure IV.3-(b). The local dispersion can be maximum near the grain boundaries as well as in the core of the grains. For example, grain 27 and grain 21 have a strong dispersion in all the grain (dispersion larger than 150%). Few areas have a dispersion smaller or equal to 0.1 (in grain 12, 17, 29 or 22 for example).

The differences are emphasized by the results plotted in figure IV.4. The average value of the cumulated plastic slip finite element response, normalized by the global mean cumulated plastic slip, along the integration point of line hline is plotted. The dispersion of the finite element responses is also represented along this line. The gradient of the cumulated plastic slip is clearly seen in the 5 grains studied. The local dispersion is significant in the grain boundaries as well as in the grain core. It varies with a factor 1 to 2 in the core of the grain 18 and with a factor 1 to 4 near the boundaries of this grain. The local dispersion magnitude is clearly higher than 150% which underlines the importance of the underlying 3D grain morphology.

IV.3 Lattice rotation fields

The figure IV.5 shows the lattice rotation maps on the reference surface for four different realizations. It is the norm of the vector associated with the elastic part of rotations ω_e . It

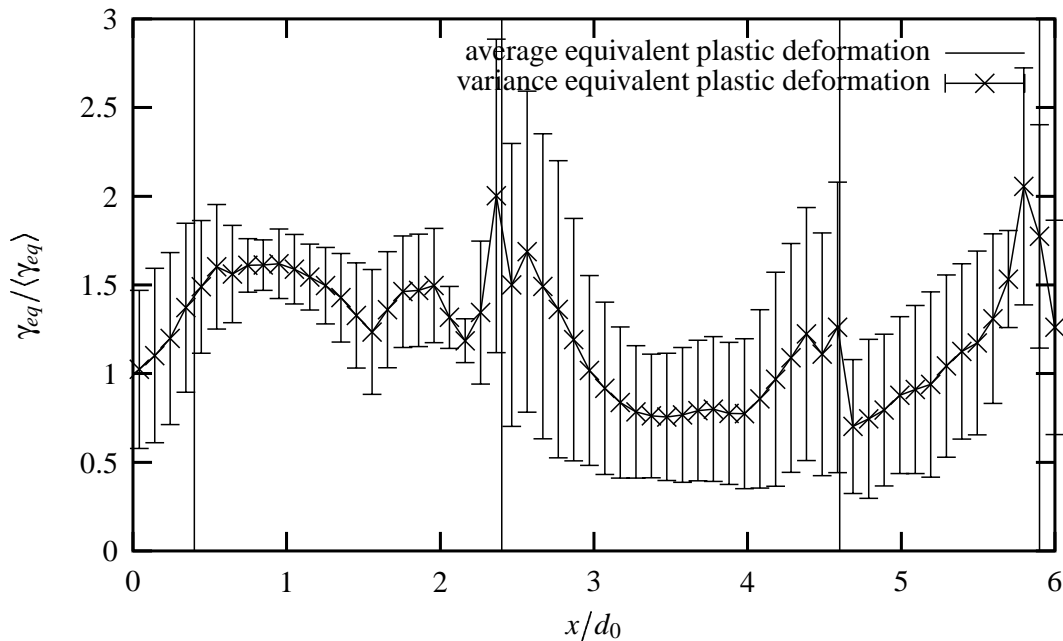


Fig. IV.4 – Variance and mean value of the cumulated plastic slip finite element response normalized by the global mean cumulated plastic slip, calculated on the reference surface along hline. x is the position along the x-axis and d_0 is the mean grain size calculated over all realizations. The vertical lines indicate the x-position of the grain boundary intersections.

corresponds to the orientation of the atomic plane in the crystalline grid after 2% plastic strain. The grain boundary grid is once again overlaid on the obtained maps in order to better catch the information in each grain.

The heterogeneity of the rotation response is observed in each realization. The response strongly differs from one realization to another. Indeed, three grains rotate by more than 2 degrees in figure IV.5-(d) (grains 15, 23 and 27) whereas four grains (grains 8, 17, 24 and 25) are concerned in figure IV.5-(c), five grains (grains 7, 12, 14, 15 and 19) in figure IV.5-(a) and 7 grains (grains 15, 16, 17, 19, 20, 21 and 23) in figure IV.5-(b). The rotation gradient is well caught in grain 30 in figure IV.5-(b), in grain 15 in figure IV.5-(c), or in grains 10 and 29 in map IV.5-(d). Besides, the grain 16 is rotated by more than 2.5 degrees in figure IV.5-(b) whereas it is rotated only 0.5 degrees in map IV.5-(a). 50% (respectively 90%) of grain 15 has more than 1.8 degrees rotated in realizations IV.5-(b) (resp. IV.5-(a)). Each map shows very different rotation distribution than the others. Figure IV.6-(a) is a map of ensemble average of the norm of the rotation vector ϕ_c normalized by the global average of it ($\bar{\phi}_c / \langle \bar{\phi}_c \rangle$) at each Gauss point. The ensemble average rotation field is strongly heterogeneous.

IV.4 Number of active slip systems

In figure IV.7, number of active slip system is shown. This number is generally high at relatively small plastic strain. One can see that the activity of the slip system is maximum (from six to eight active slip systems) near the grain boundaries. The number of active slip system map is different from one realization to another. In figure IV.7-(a) and IV.7-(b), for instance, the activity is different in the core of grains 17 and 15. Grain 17 has 4 slip system activ in figure IV.7-(a) whereas only one system is active in the same grain in realization of

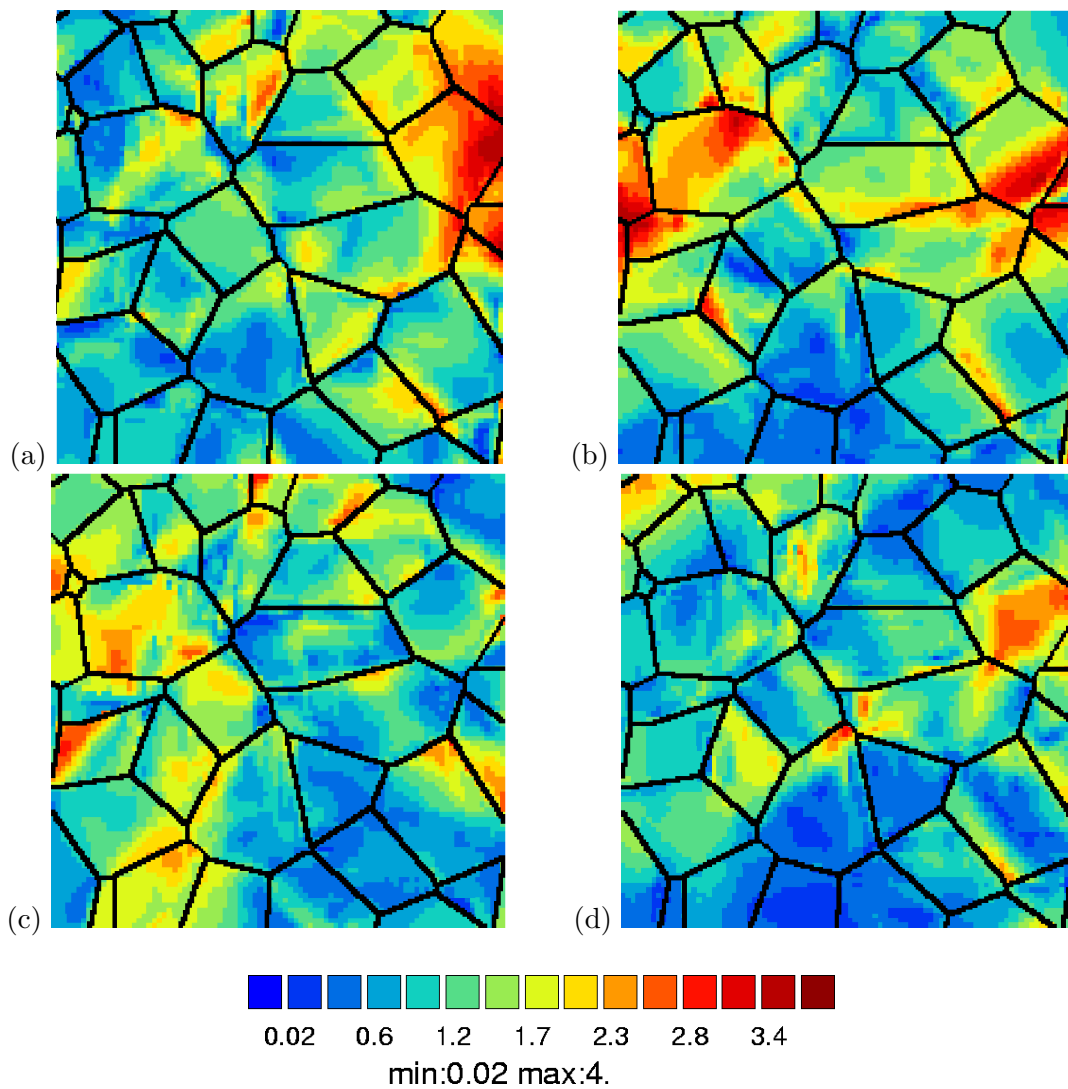


Fig. IV.5 – Lattice rotation distribution maps (unit degrees) for four different environments in the third direction.

figure IV.7-(b). The results of the activity of grain 15 shows between 2 and 4 active slip systems in realization IV.7-(a) and between 4 and 7 slip systems in realization IV.7-(b).

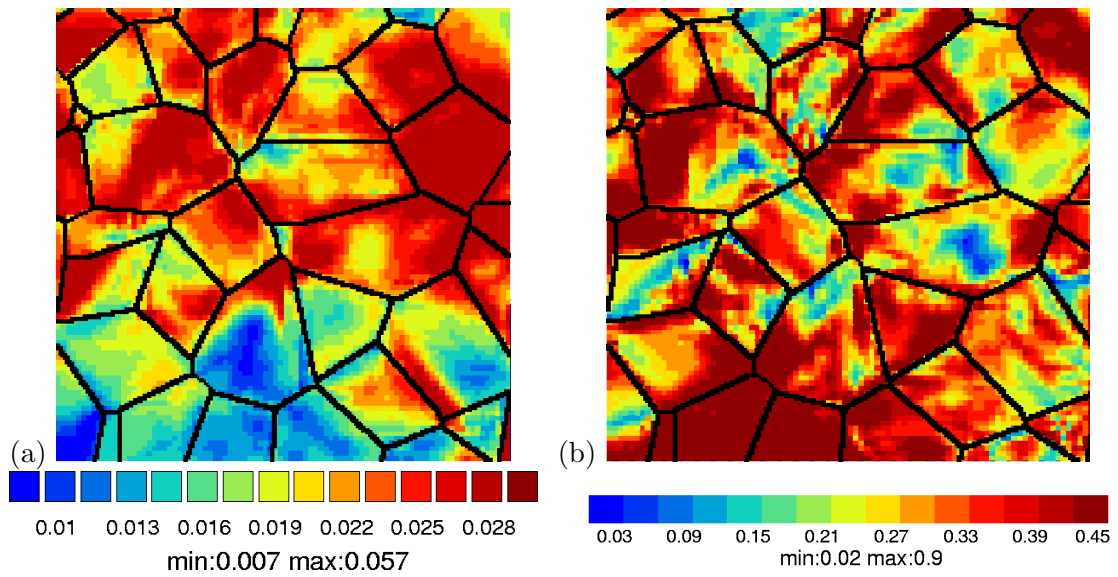


Fig. IV.6 – (a) Ensemble average rotation maps : for ϕ_c being the norm of the rotation vector, the quantity represented is $\bar{\phi}_c / \langle \bar{\phi}_c \rangle$ (b) Variance of the ensemble average rotation maps : the quantity represented is $D(\phi_c) = \langle \bar{\phi}_c^2 \rangle$.

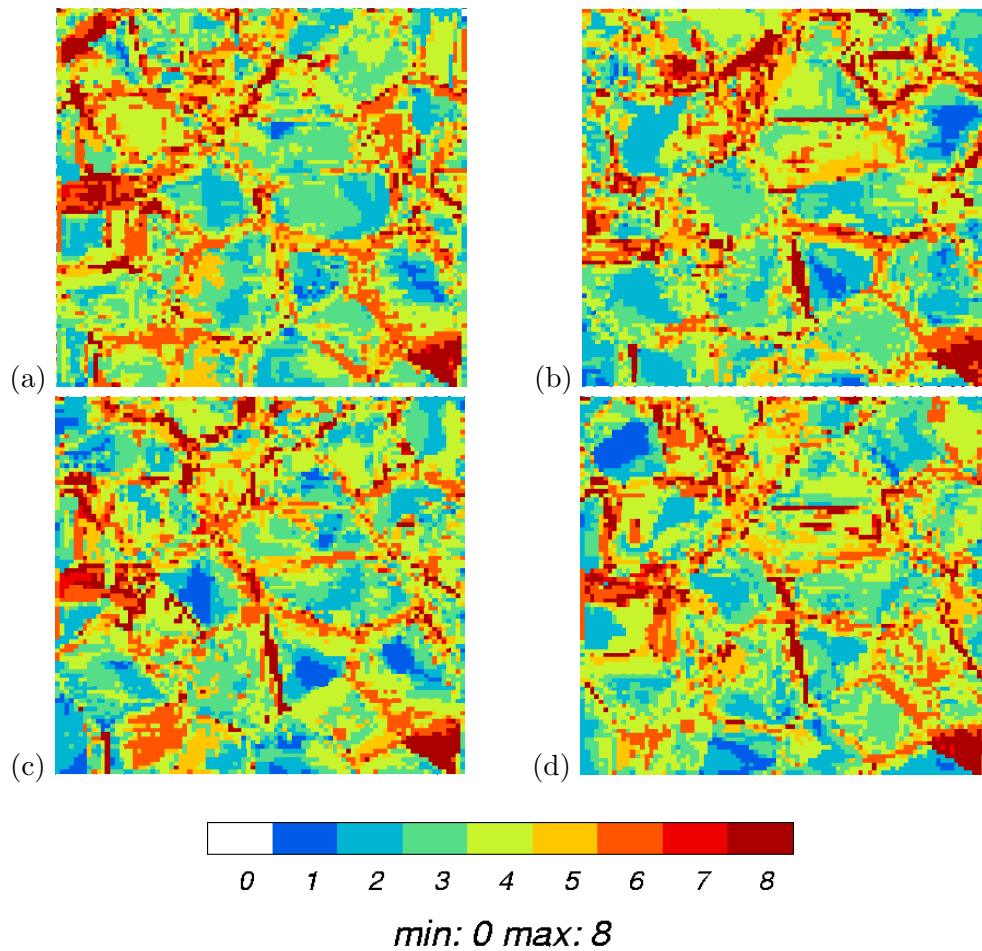


Fig. IV.7 – Active slip system number maps for four different realizations.

Conclusions and outlook

Finite element response of several synthetic polycrystals that have the same surface microstructure but different grain morphology below the surface were simulated in elasticity and in elastoplasticity. In this aim, synthetic microstructures can be created to represent a polycrystal with a controlled surface microstructure. An original construction algorithm is proposed, based on the Voronoi polyhedra model. The same grain orientation distribution can be applied to the aggregates. The purpose of this part was to quantify the influence of the grain morphology on the surface fields. In order to restrict the statistical error due to both the mesh size and the thickness of the aggregate, the influence of the mesh refinement and the effect of the number of grains in the thickness on the surface response was first considered. A good quality-price ratio for the mesh size and the number of grains in the thickness has been chosen. Comparing each realization response, several typical results are extracted.

- Strong heterogeneities are observed in all the surface computations results.
- The maximum stresses are localized near the grain boundaries, especially in the case of elasticity.
- In elastic computations, the shape of the grains can be recognized from the distribution of equivalent stress.
- The strong differences to one particular 3D realization to another are observed both near the grain boundaries and in the grain core, both in elastic surface response and in elastoplastic surface response.
- Maps of ensemble averaged stress and strain were provided together with the map of local dispersion.

The present paper gives then an answer to several investigations :

- At the surface, the 3D realization with columnar grain stress response is close to the ensemble average response on the eighteen particular 3D realizations, but only in elasticity.
- The local dispersion of the von Mises equivalent stress response is of the order of 30% in the elastic case, for tensile tests over N realizations and one given reference surface.
- The local dispersion of the cumulated plastic strain response is more than 150% in the elastoplastic case for 2% mean strain, for tensile tests over N realizations and one given reference surface.

The main conclusion is :

For comparison with experimental strain or lattice rotation field measurement, it is necessary to take the actual 3D morphology of the grains beneath the surface into account. If only qualitative assessment are needed, ensemble average maps can be useful. In the case of FCC

crystals and in the case of elasticity, the ensemble average maps may be close to the maps of 3D columnar grains.

At this part of the study, several perspectives are open : If the results obtained for a 2D computation are in agreement with the experimental results, it stands a strong chance that the structure of the real sample is not far from a columnar grain morphology. An example of such a situation can be found for instance in (Mary et al., 2005). This study can then be useful in non destructive analysis, in order to check up whether the first grain layer has an equiaxed structure or not. An interesting idea is to create a procedure of 3D morphology reconstruction, starting from the surface field measurements. It is imaginable with the present work because according to the 3D morphology, very different surface responses are obtained, at least for the first layer.

Deuxième partie

Effets d'échelle en plasticité
cristalline

Chapitre -VI-

Effets de taille en métallurgie physique et modèles continus à longueur interne

Sommaire

VI.1	Eléments de métallurgie physique en plasticité cristalline	39
VI.1.1	Durcissement d'Orowan	40
VI.1.2	Durcissement Hall-Petch	40
VI.1.3	Empilements de dislocations	41
VI.1.4	Interaction entre dislocations	41
VI.1.5	Le joint de grain comme source de dislocations	41
VI.1.6	Interprétation de la loi de Hall-Petch	41
VI.2	Densités de dislocations	42
VI.2.1	Densités de dislocations statistiques	42
VI.2.2	Densité de dislocations d'accommodation géométrique	44
VI.2.3	Courbure de réseau	45
VI.3	Modèles de plasticité continue à longueur interne	45
VI.3.1	Extensions du modèle de plasticité cristalline basées sur le milieu de Cauchy	46
VI.3.2	Modèle de Cosserat du monocristal	50
VI.3.3	Modèle du second gradient du monocristal	51
VI.3.4	Modèles à gradients de variables internes	53
VI.3.5	Choix du modèle	54

VI.1 Eléments de métallurgie physique en plasticité cristalline

Expérimentalement, on observe un lien étroit entre la taille des constituants et la réponse des matériaux métalliques à une sollicitation mécanique. L'effet de taille de grain observé expérimentalement se traduit par un durcissement pour les tailles de grain les plus petites. C'est la modélisation de cet effet qui est aujourd'hui un sujet d'intérêt majeur notamment dans la course des aciers à grains ultra-fins. Les échelles de longueur qui entrent en jeu varient

de la centaine de micromètres à la centaine de nanomètres. L'origine physique de cet effet est relié au concept des dislocations, introduit comme outil de la modélisation (Orowan,1934). La modélisation du comportement plastique s'appuie sur le processus physique de glissement cristallographique, caractéristique des matériaux polycristallins. Orowan a avancé l'hypothèse que le glissement cristallographique repose sur le mouvement des dislocations.

La prédiction de la relation contrainte-déformation ou des champs locaux dans le cas d'un polycristal est parfois mise en défaut par des observations expérimentales. Il faut en effet tenir compte des mécanismes de déformation à l'intérieur des grains et de l'accommodation des efforts inter-granulaires. Ashby (Ashby, 1970) a introduit cette notion dans un modèle de comportement de polycristal. Ashby a supposé que chaque grain se déforme en glissement simple. Cela conduit à un stockage de dislocations du même type unique, aux vecteurs de Burgers opposés, sur les parties opposées des joints de grain. Un grain est "divisé" en deux régions, l'une à faible densité de dislocations où la déformation est homogène (dislocations dites statistiquement distribuées), et l'autre à plus forte densité de dislocations où s'opère l'accommodation des dislocations entre les grains (dislocations d'accommodation géométriques). Dans le modèle d'Ashby, cette zone à forte densité de dislocations d'accommodation géométriques correspond à une bande, le long des joints de grains.

VI.1.1 Durcissement d'Orowan

L'un des mécanismes qui contribue activement au durcissement de la structure est le mécanisme de durcissement par précipitation. Les précipités, cohérents et incohérents, interagissent avec les dislocations. Si les premiers peuvent être cisailés par les dislocations, ce n'est pas le cas des seconds ; les précipités sont alors contournés par les dislocations. Ce processus est appelé mécanisme d'Orowan, où chaque dislocation ajoute une boucle résiduelle autour des particules. La taille apparente du précipité augmente donc à chaque activation de la source de Frank-Read. Le phénomène d'écrouissage γ est bien évidemment élevé.

La contrainte qu'il faut alors appliquer pour permettre le contournement des précipités par les lignes de dislocations dépend directement du libre parcours moyen.

Le mouvement d'une dislocation est alors fonction de la valeur Λ , distance entre les précipités. Dès lors, si $r \ll \Lambda$ (r étant le rayon de courbure des dislocations), la courbure autour des particules est facilitée. Néanmoins, une contrainte reste nécessaire pour courber la ligne de dislocations, jusqu'à former ensuite une boucle de rayon $\frac{1}{2}\Lambda$. Orowan a donné une forme simplifiée de cette contrainte critique, dans le cas où les dislocations viennent de passer les précipités, mais ont laissé des boucles résiduelles autour des particules (Honeycombe, 1984a) :

$$\tau_0 = \tau_s + \frac{T}{b\frac{\Lambda}{2}} \quad (\text{VI.1})$$

avec τ_s la contrainte critique de cisaillement de la matrice et T , la tension de ligne des dislocations. La contrainte varie donc en fonction de l'inverse de la distance entre les précipités.

VI.1.2 Durcissement Hall-Petch

La relation de Hall-Petch relie la contrainte seuil à la taille de grain par la relation :

$$\sigma_y = \sigma_0 + kd^{-1/2} \quad (\text{VI.2})$$

où d est la taille de grain, σ_0 la contrainte de friction et k le facteur de Hall-Petch. L'interprétation physique de cette relation repose sur la théorie d'empilement des dislocations du même signe, générée par une source de Frank-Read.

Dans sa formulation initiale, la relation de Hall-Petch relie la contrainte d'écoulement à la taille de grain. Appliquée à des matériaux métalliques en plasticité cristalline, elle est à l'origine de nombreuses discussions. L'interprétation physique de la relation de Hall-Petch repose sur des mécanismes basés sur la théorie des dislocations.

VI.1.3 Empilements de dislocations

La première hypothèse initialement avancée pour expliquer la relation de Hall-Petch (Hall, 1951 et Petch, 1953) suggère que l'augmentation de la contrainte aux joints de grains est due à la formation d'empilements de dislocations. A terme, cette concentration de contrainte conduit à l'activation de sources de dislocations dans les grains voisins : le glissement se propage de grain en grain.

VI.1.4 Interaction entre dislocations

(Ashby, 1970) et plus tard (Arsenlis and Parks, 1999) ont proposé une théorie basée sur la notion de densité de dislocations. Plus le grain sera petit, plus la densité de dislocations sera élevée pour une déformation donnée (Mecking and Kocks, 1981; Estrin and Mecking, 1984). En introduisant le concept de libre parcours moyen d'une dislocation et le gradient de la déformation on retrouve la relation de Hall-Petch en $d^{-1/2}$.

VI.1.5 Le joint de grain comme source de dislocations

Enfin, une idée avancée a été que la concentration de contrainte créée à l'origine par les empilements de dislocations n'est pas nécessaire pour activer le glissement de grain à grain. Ce sont alors les joints de grains, qui sous l'action d'un chargement extérieur, se comportent comme des sources de dislocations.

VI.1.6 Interprétation de la loi de Hall-Petch

La cission critique τ nécessaire pour résorber la réaction de gêne au passage d'une dislocation de vecteur de Burgers \underline{b} dans un réseau de dislocations de densité ρ^F est (François et al., 1991) :

$$\tau = \alpha\mu b\sqrt{\rho^F} \quad (\text{VI.3})$$

avec $\frac{1}{4} < \alpha < \frac{1}{3}$.

En présence de frottement de réseau, la contrainte de glissement d'une dislocation de la forêt s'écrit :

$$\tau = \tau_0 + \alpha\mu b\sqrt{\rho^F} \quad (\text{VI.4})$$

où τ_0 est la contrainte de frottement assimilable à la limite d'élasticité du cristal. Les contributions des particules et des solutés sont inclus dans le terme τ_0 . On admet qu'il existe une relation linéaire entre la densité de dislocations mobiles ρ^m et la densité de la forêt ($\rho^F = \beta\rho^m$). La relation d'Orowan relie l'incrément de déformation $d\gamma$ à un incrément de densité de dislocations mobiles $d\rho^m$ de libre parcours L :

$$d\gamma = bLd\rho^m \quad (\text{VI.5})$$

On se ramène alors à

$$\tau = \tau_0 + \alpha\mu b\sqrt{\beta\rho^m} = \tau_0 + \alpha\mu b\sqrt{\frac{\beta\gamma}{bL}} \quad (\text{VI.6})$$

si le libre parcours moyen est proportionnel à la taille de grain ($L = \lambda d$), il vient :

$$\tau = \tau_0 + \alpha\mu b\sqrt{\beta\rho^m} = \tau_0 + \alpha\mu b\sqrt{\frac{b\beta\gamma}{\lambda}}d^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{VI.7})$$

où encore,

$$\tau = \tau_0 + kd^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{VI.8})$$

où τ_0 et k sont des constantes.

Une extension de la relation de Hall-Petch a été proposée par Armstrong (1962). La contrainte τ pour une déformation donnée ϵ est ainsi reliée à la taille de grain sous la forme :

$$\tau(\epsilon) = \tau_0(\epsilon) + k(\epsilon)d^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{VI.9})$$

$\tau_0(\epsilon)$ et $k(\epsilon)$ sont des constantes pour une déformation donnée. La relation de Hall-Petch est longuement discutée dans (Hansen, 2004).

VI.2 Densités de dislocations

C'est la multiplication, le mouvement et l'accumulation de dislocations qui sont à l'origine de la déformation plastique et du durcissement du matériau. Les dislocations s'accumulent pour deux raisons :

- elles s'accumulent en se bloquant les unes et les autres (effet de la forêt),
- ou elles sont utilisées pour assurer la compatibilité de la déformation en différents endroits du cristal.

On rencontre couramment dans la littérature cette distinction entre "familles" de dislocations. Ainsi, les dislocations peuvent être séparées en deux catégories :

- les dislocations statistiquement distribuées (notée avec l'exposant S dans la suite), qui trouvent leur origine dans le processus d'accumulation par "blocage mutuel" des dislocations au cours de la déformation plastique.
- les dislocations d'accommodation géométrique (notées avec l'exposant G), associées aux incompatibilités de déformation du réseau cristallin.

VI.2.1 Densités de dislocations statistiques

Les dislocations statistiquement distribuées (SSD's) s'accumulent au cours de la déformation uniforme. On considère le déplacement relatif de deux points matériels d'une structure cristalline. Ces deux points sont séparés de dx_i , dans le repère cartésien de référence. Le déplacement relatif se décompose comme suit (Fleck et al., 1994) :

$$du_i = du_i^s + du_i^r + du_i^e \quad (\text{VI.10})$$

avec

$$du_i^s \equiv \gamma_{ij}dx_j, \quad du_i^r \equiv \phi_{ij}dx_j, \quad du_i^e \equiv \varepsilon_{ij}^{el}dx_j \quad (\text{VI.11})$$

du_i^s est le déplacement relatif dû au glissement, du_i^r est celui dû à la rotation de la matière et du_i^e est celui dû à l'extension élastique de la structure. γ_{ij} est le tenseur de glissement plastique, ϕ_{ij} est le tenseur de rotation matérielle et ε_{ij}^{el} est le tenseur de déformation élastique.

Un système de glissement particulier s est caractérisé par le couple de vecteurs ($\underline{\mathbf{l}}^{(s)}, \underline{\mathbf{n}}^{(s)}$) où $\underline{\mathbf{l}}^{(s)}$ est la direction de glissement et $\underline{\mathbf{n}}^{(s)}$ caractérise le plan de glissement. La cinématique de glissement est :

$$\dot{\gamma}_{ij} = \sum_s \dot{\gamma}^{(s)} l_i^{(s)} n_j^{(s)} \quad (\text{VI.12})$$

où $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ est la vitesse de glissement sur chaque système de glissement actif.

On coupe fictivement un cristal pour délimiter une surface \mathcal{S} de normale extérieure $\underline{\mathbf{n}}$. On définit ainsi B_i comme le déplacement résultant de la fermeture d'un circuit de Burgers sur un contour Γ qui délimite la surface \mathcal{S} .

$$B_i = \oint_{\Gamma} du_i^s = \oint_{\Gamma} \gamma_{ij} dx_j \quad (\text{VI.13})$$

ce qui peut s'écrire, en utilisant le théorème de Stokes :

$$B_i = \oint_{\mathcal{S}} \alpha_{in} n_n dS \quad (\text{VI.14})$$

avec $\alpha_{in} = e_{nkj} \gamma_{ij,k}$

où e_{nkj} est le signe de la permutation (i, j, k). On peut aussi interpréter $\underline{\alpha}$, tenseur densité de dislocations comme la moyenne, sur un volume donné, du produit du vecteur de Burgers $\underline{\mathbf{b}}$ par le vecteur ligne de dislocations $\underline{\xi}$ (Kröner, 1969) :

$$\underline{\alpha}(x) = \langle \underline{\mathbf{b}} \otimes \underline{\xi} \rangle (x) \quad (\text{VI.15})$$

On définit ensuite un tenseur d'ordre 4, $\underline{\underline{\alpha}}$, tel que :

$$\underline{\underline{\alpha}}(x, x') = \langle (\underline{\mathbf{b}} \otimes \underline{\xi})(x) \otimes (\underline{\mathbf{b}} \otimes \underline{\xi})(x') \rangle \quad (\text{VI.16})$$

La moyenne de l'invariant α_{ijij} de ce tenseur, sur le volume \mathcal{V} est donc (Forest and Fivel, 2001) :

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} \alpha_{ijij}(x, x) dV = \frac{1}{V} b^2 \int_{\mathcal{V}} \chi(x) dV = b^2 \frac{L}{V} = b^2 \rho \quad (\text{VI.17})$$

χ étant la fonction indicatrice de la présence ou non d'une dislocation, L la longueur de ligne de dislocation contenues dans \mathcal{V} et ρ la densité de dislocations au sens de la métallurgie physique.

On considère à présent un élément de volume infinitésimal d'un monocristal soumis à des contraintes mécaniques. On appelle configuration intermédiaire relâchée une configuration dans laquelle l'élément de volume est découpé du corps matériel qui l'environne et se retrouve donc libre de toute contrainte. La configuration intermédiaire est choisie de sorte que l'orientation du cristal et l'orientation initiale avant déformation soient les mêmes. On décompose alors la transformation \mathbf{F} telle que :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \quad (\text{VI.18})$$

\mathbf{F}^p est la transformation plastique qui permet de passer de la configuration initiale à la configuration intermédiaire et \mathbf{F}^e est la transformation élastique qui décrit le passage de la configuration intermédiaire à la configuration courante.

Le tenseur \mathbf{F}^e relie les vecteurs infinitésimaux $\underline{\mathbf{d}}\xi$ et $\underline{\mathbf{d}}\mathbf{x}$ tel que :

$$\underline{\mathbf{d}}\xi = (\mathbf{F}^e)^{-1} \cdot \underline{\mathbf{d}}\mathbf{x} \quad (\text{VI.19})$$

Si x appartient à la configuration courante, le défaut de fermeture s'écrit :

$$B = - \oint_{\Gamma} (\mathbf{F}^e)^{-1} \cdot \underline{\mathbf{d}}\Gamma \quad (\text{VI.20})$$

L'application de la formule de Stokes conduit à l'expression du défaut de fermeture en fonction du tenseur de densité de dislocations de Nye :

$$B = - \int_{\mathcal{S}} \text{rot}(\mathbf{F}^e)^{-1} \cdot \underline{\mathbf{n}} dS = \int_{\mathcal{S}} \underline{\underline{\alpha}} \cdot \underline{\mathbf{n}} dS \quad (\text{VI.21})$$

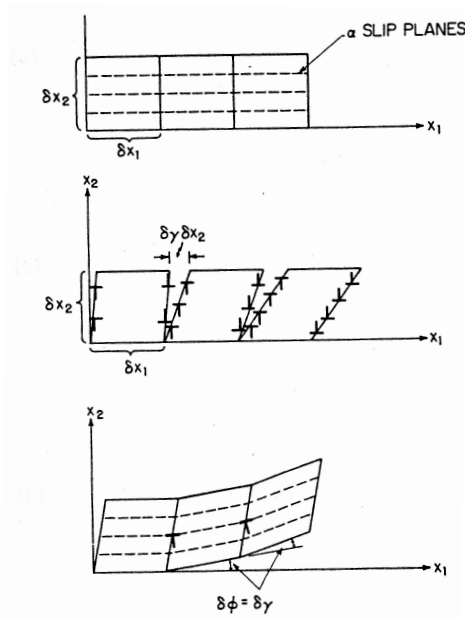


Fig. VI.1 – Schéma d'un cristal soumis à un gradient de cisaillement : les dislocations s'annihilent entre elles mais certaines restent en excès. Ce sont les dislocations d'accommodation géométrique ρ^G qui contribuent à l'accommodation du réseau cristallin. On obtient ainsi une courbure du réseau du cristal (Ashby, 1970).

avec

$$\underline{\alpha} = -rot(\underline{\mathbf{F}}^e)^{-1} = -e_{jkl}(F_{il,k}^e)^{-1}\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (\text{VI.22})$$

Une expression équivalente de $\underline{\alpha}$ en fonction du rotationnel de la déformation plastique $\underline{\mathbf{F}}^p$ peut être obtenue en utilisant la compatibilité du champ $\underline{\mathbf{F}}$. On la donne ici dans le contexte des petites transformations utilisé dans ce travail :

$$\underline{\alpha} = -rot(\underline{\xi}^p + \underline{\omega}^p) \quad (\text{VI.23})$$

VI.2.2 Densité de dislocations d'accommodation géométrique

La notion de densité de dislocations d'accommodation géométrique (GND's) a au départ été introduite par (Nye, 1953) puis reprise par (Ashby, 1970) et (Kröner, 1969). Le durcissement du matériau est initié par la résistance au mouvement des dislocations au cours de la déformation plastique. Les GND's sont alors nécessaires pour accommoder la structure du réseau cristallin au cours de la déformation plastique non uniforme (en présence de courbure du réseau cristallin par exemple). On les retrouve donc essentiellement là où se localise la discontinuité de la structure cristalline, c'est-à-dire aux joints de grains. On ne distinguera pas, en termes de dislocations, les statistiquement distribuées des géométriquement nécessaires (Gao and Huang, 2003). (Ashby, 1970) a très clairement illustré la présence de GND's, illustration reprise ici sur la figure VI.1. En effet, on considère un cristal divisé en plusieurs blocs. On soumet ce cristal à un gradient de cisaillement. Les dislocations de signes opposés s'annihilent entre elles d'une cellule à l'autre. L'excès de dislocations qui résulte de ce processus d'annihilation correspond à une densité ρ^G , directement proportionnelle au gradient du glissement $\frac{\delta\gamma}{\delta x}$ suivant la relation :

$$\rho^G = \frac{1}{b} \frac{\delta\gamma}{\delta x} \quad (\text{VI.24})$$

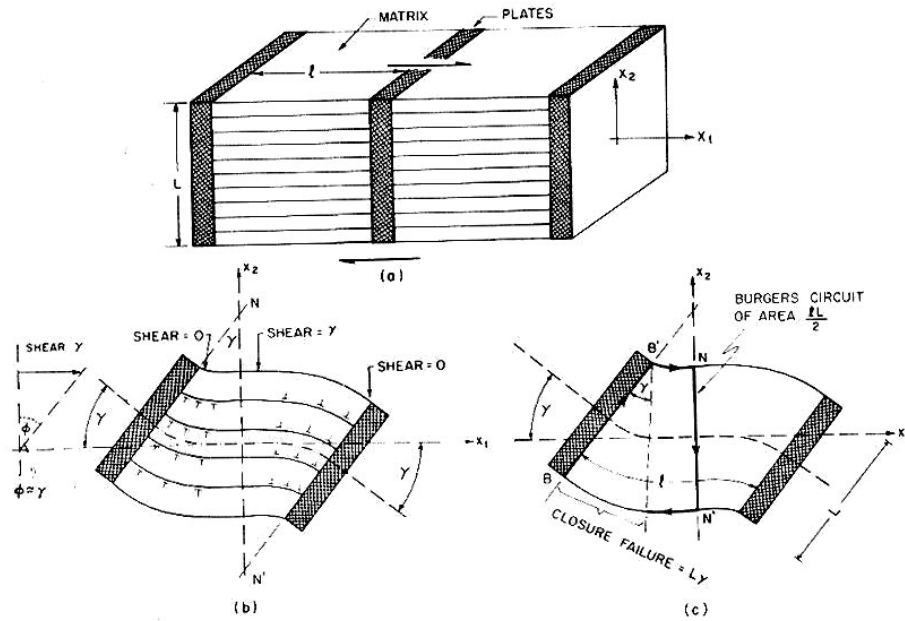


Fig. VI.2 – Plasticité confinée dans un biphase constitué d'une phase élastoplastique et d'une phase dure élastique. La formation d'empilements de dislocations est à l'origine de la déformation non-homogène dans la phase molle (d'après (Ashby, 1970)).

L'exposant G indique qu'il s'agit là de dislocations géométriquement nécessaires.

VI.2.3 Courbure de réseau

La figure VI.2 illustre également la rotation de la structure induite par le gradient de cisaillement. On observe la courbure des plans lorsqu'on impose le gradient de déformation et la rotation entre les cellules s'écrit $\delta\phi \equiv \delta\gamma$. La courbure du réseau cristallin s'écrit :

$$\kappa = \frac{\delta\phi}{\delta x} = \rho^G b \quad (\text{VI.25})$$

On peut également relier la courbure du réseau au tenseur densité de dislocations de Nye sous la forme :

$$\alpha_{ij} = \kappa_{ji} - \kappa_{mm} \delta_{ij} \quad (\text{VI.26})$$

soit écrit sous une forme tensorielle :

$$\alpha = \underline{\underline{\kappa}}^T - (\text{tr } \underline{\underline{\kappa}}) \mathbf{I} \quad (\text{VI.27})$$

VI.3 Modèles de plasticité continue à longueur interne

Les modèles classiques de la plasticité cristalline doivent être enrichis pour rendre compte d'effets de taille dans les monocristaux et les polycristaux métalliques. On présente ici différentes généralisations du schéma classique depuis les formulations les plus simples jusqu'aux théories les plus élaborées et les plus récentes.

VI.3.1 Extensions du modèle de plasticité cristalline basées sur le milieu de Cauchy

On décrit ici la classe de modèles qui s'appuient sur le milieu continu classique, dit de Cauchy, et qui font appel à des variables internes supplémentaires capables de rendre compte d'effets d'échelle. Les deux premiers modèles décrits ici concernent la plasticité des polycristaux à l'aide de méthodes d'homogénéisation classique, à savoir les modèles de Taylor et autocohérent.

a) Le modèle de polycristal de Weng

Les méthodes d'homogénéisation classiques ont permis dans les 40 dernières années de mettre en place des modèles de polycristaux prenant en compte la texture cristallographique des matériaux et le glissement moyen dans les grains (Sanchez-Palencia and Zaoui, 1987). Le schéma autocohérent pour le comportement élastoplastique des polycristaux proposé par (Berveiller and Zaoui, 1979) permet de prévoir le comportement du polycristal à partir de la loi de comportement du monocristal. Il sera présenté en détail dans la partie VIII.2.1-a). On indique ici uniquement les ingrédients principaux du modèle. La texture est discrétisée en un nombre M d'orientations cristallographiques, appelées phases ou grains par abus de langage. Les contraintes et déformations macroscopiques sont les moyennes des grandeurs correspondantes par phase :

$$\underline{\Sigma} = \sum_{g=1}^M f^g \underline{\sigma}^g, \quad \underline{\mathbf{E}} = \sum_{g=1}^M f^g \underline{\varepsilon}^g \quad (\text{VI.28})$$

Pour chaque phase, la déformation plastique moyenne résulte du glissement selon N systèmes de glissement :

$$\underline{\dot{\mathbf{E}}}^{pg} = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s \underline{\mathbf{P}}^{gs} \quad (\text{VI.29})$$

où $\underline{\mathbf{m}}^{gs}$ est le tenseur d'orientation du système s dans le grain g . On suppose que la loi de comportement au niveau du grain est la même que celle utilisée dans la première partie de ce travail (voir paragraphe IV.1). Les paramètres de cette loi dépendent en fait de la taille de grain et sont en général identifiés par approche inverse à partir d'une réponse de polycristal (Fivel and Forest, 2004). Le modèle complet est alors utilisable pour décrire d'autres types de chargement mécanique. Comment généraliser le modèle homogénéisé du polycristal pour intégrer directement cet effet de taille de grain ?

Weng (Weng, 1983) a proposé de relier directement la contrainte seuil du grain sur le système de glissement, à la taille de grain d . Il introduit pour cela explicitement une loi de Hall et Petch au niveau du monocristal. Ainsi, on écrit le τ critique sur un système de glissement s :

$$\tau = \tau^\infty + k d^{-\frac{1}{2}} + h(\gamma^s)^n, \quad h = h(d) \quad (\text{VI.30})$$

La cission résolue critique initiale du monocristal massif est τ^∞ . Le module d'écrouissage est h et l'effet de taille de grain est contenu dans le terme $k d^{-\frac{1}{2}}$ de Hall-Petch. On se place non plus du point de vue de l'agrégat mais plus localement, c'est-à-dire au niveau du grain. On fait ensuite appel aux méthodes d'homogénéisation (modèle de type schéma auto-cohérent) pour observer l'effet de taille de grain au niveau de l'agrégat. On fait l'hypothèse de l'élasticité isotrope et on néglige les effets induits par la rotation des grains. Weng applique ce modèle à la description d'effets de taille de grain dans le polycristal de cuivre pour des tailles de grain allant de 12 à 220 μm .

C'est une méthode efficace pour intégrer de manière phénoménologique l'effet de taille de grain dans les modèles d'homogénéisation pour les polycristaux. Cependant il est discutable d'écrire au niveau du grain une loi de Hall-Petch qui est fondamentalement une relation macroscopique. Le fait que les déformations et contraintes par grain g soient la moyenne de ces grandeurs pour tous les grains réels ayant une orientation proche de g , donne toutefois une certaine légitimité à ce modèle. Le handicap majeur de ce modèle est qu'il suppose la connaissance préalable des paramètres de la loi de Hall et Petch. Le modèle n'est donc pas prédictif en général.

Lorsqu'il s'agit de décrire les champs locaux au sein même des grains comme dans la première partie de ce travail, il n'est plus légitime d'employer, point par point, la loi (VI.30). D'autres solutions sont proposées dans la suite.

b) Lois d'écroissage étendues

De nombreux auteurs introduisent un terme d'écroissage supplémentaire afin de rendre compte d'effets de taille de précipité ou de taille de grain. La loi d'écroissage étendue intègre en général l'influence de la densité de dislocations d'accommodation géométrique ρ^G . Deux difficultés se présentent :

- évaluer la densité ρ^G à partir de la connaissance du champ (ou simplement de sa moyenne par grain) de glissement plastique au sein du grain ;
- formuler explicitement la fonction de durcissement supplémentaire. C'est en général une relation en $\sqrt{\rho^S + \rho^G}$ ou une description plus détaillée en fonction des contributions des différents systèmes.

De manière formelle, on écrira l'écroissage supplémentaire sous la forme

$$r^s = r_0 + R^S + R^G \quad (\text{VI.31})$$

L'écroissage dû aux densités de dislocations statistiquement distribuées et noté R^S est classiquement utilisé depuis plus de 30 ans. Il reste à définir la contribution due au tenseur densité de dislocations R^G . On présente ci-dessous deux exemples de mise en œuvre de cette approche.

c) Modèle d'Evers du polycristal

Evers *et al.* reprennent le modèle de Taylor du polycristal caractérisé par une déformation uniforme dans le polycristal (Evers *et al.*, 2002). Ils modifient le schéma afin de restaurer l'équilibre des efforts moyens au niveau des joints de grains. Pour cela, les auteurs introduisent la phase *cœur de grain* et un cortège de N_b bicristaux embrassant le joint de grain et deux portions de cristaux de part et d'autre du joint (voir figure VI.3). La contrainte moyenne par grain est alors définie par

$$\bar{\sigma}^g = \vartheta \bar{\sigma}^{g,core} + (1 - \vartheta) \frac{1}{N_b} \sum_{b=1}^{N_b} \bar{\sigma}^{g,b} \quad (\text{VI.32})$$

La fraction volumique du cœur est donnée par ϑ . La contrainte moyenne dans le cœur du grain g est $\bar{\sigma}^{g,core}$. La contrainte macroscopique est toujours donnée par (VI.28). On renvoie à l'article (Evers *et al.*, 2002) pour la définition des bicristaux. Le modèle introduit explicitement une longueur interne l

$$l = (1 - \vartheta^{1/3}) \frac{d}{2} \quad (\text{VI.33})$$

où d est la taille de grain. La longueur l est l'épaisseur de la coquille entourant chaque grain. Le comportement du cœur et des bicristaux correspondants est régi par les équations de la

plasticité cristalline en grande transformation. La connaissance de la déformation plastique moyenne de la partie i de chaque bicristal et de cœur du grain permet d'évaluer la densité de dislocations d'accommodation géométrique induite par les incompatibilités de déformation de grain à grain, par l'intermédiaire du tenseur densité de dislocations. L'estimation proposée de ce tenseur est

$$\underline{\underline{\Lambda}} = - \left(\underline{\mathbf{n}}_0^b \wedge \frac{\Delta \underline{\mathbf{F}}_p^T}{l} \right)^T, \quad \Delta F_p^T = \underline{\mathbf{F}}_p^i - \underline{\mathbf{F}}_p^{core} \quad (\text{VI.34})$$

où $\underline{\mathbf{n}}_0^b$ est la normale au joint de grain considéré, dans la configuration initiale. La condition d'équilibre moyen à l'interface du bicristal (i, e) est introduite dans le modèle :

$$(\underline{\sigma}^{b,i} - \underline{\sigma}^{b,e}) \cdot \underline{\mathbf{n}}^b = 0 \quad (\text{VI.35})$$

Une décomposition du tenseur densité de dislocations ainsi estimé, selon les contributions de densités de dislocations d'accommodation géométrique associées aux dislocations de type vis et coin est obtenue grâce à la procédure proposée dans (Arsenlis and Parks, 1999) :

$$\underline{\underline{\Lambda}}_0 = \sum_u \rho^{G,u} \underline{\mathbf{b}}_O^u \otimes \underline{\xi}_O^u \quad (\text{VI.36})$$

L'écroissage supplémentaire associé à ces dislocations d'accommodation géométrique est pris de la forme :

$$R^{G,s} = Q^G \sqrt{\sum_u a^{su} |\rho^{G,u}|} \quad (\text{VI.37})$$

La contribution classique est incorporée dans l'écroissage total sous la forme :

$$R^s = \left((R^{S,s})^p + (R^{G,s})^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (\text{VI.38})$$

Le modèle est utilisé enfin pour calculer la réponse en traction de polycristaux de cuivre pour des tailles de grains allant de 14 μm à 220 μm . Pour cela, une valeur arbitraire $\vartheta = 0.5$ est utilisée. Le modèle prévoit une dépendance de la contrainte macroscopique en d^{-n} avec $0.5 < n < 0.9$.

Dans cette approche, le choix de la longueur interne l reste délicat. Lorsque la taille de grain est modifiée, la fraction volumique ϑ est supposée constante dans les calculs présentés dans (Evers et al., 2002). Des calculs par éléments finis sur des agrégats polycristallins avec des modèles de plasticité cristalline présentés dans la suite peuvent permettre de justifier ou d'infirmer ces choix. Une limitation importante du modèle est la suivante : la limite d'élasticité initiale à 0.0002 de déformation plastique ne semble pas dépendre de la taille de grain, ce qui est contraire à de nombreuses observations expérimentales.

d) Introduction du tenseur densité de dislocations comme variable interne dans les modèles de plasticité du monocristal

Lorsque l'on effectue des calculs de monocristaux, de multicristaux ou d'agrégats polycristallins avec une résolution suffisamment fine au sein de chaque grain, en utilisant les lois classiques de la plasticité du monocristal présentée au paragraphe IV.1. on dispose du champ en général hétérogène de déformation plastique à chaque instant. Il est donc possible d'évaluer le tenseur densité de dislocations et les densités ρ^G associées en calculant le rotationnel de la déformation plastique ou de certaines de ces contributions. Cette évaluation précise constitue en quelque sorte un *post-traitement* à effectuer à la fin de chaque incrément. Dès lors, rien n'empêche alors d'introduire les valeurs trouvées dans les équations de

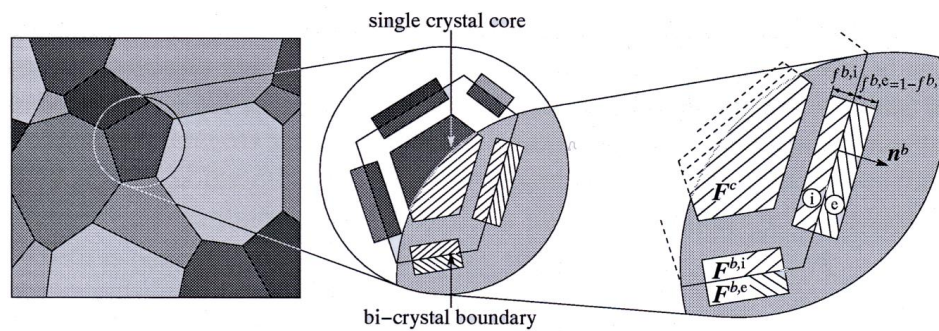


Fig. VI.3 – À partir d'un agrégat (à gauche), chaque grain est décomposé en 2 principales parties constitutives : un cœur de grain et plusieurs parties joints de grains ((Evers et al., 2004)).

comportement, par exemple en introduisant en chaque point du milieu cristallin l'écroutissage supplémentaire R^G fonction des ρ^G ainsi évalués. C'est l'idée qui préside à toute une classe de modèles dits de plasticité à gradients. L'idée originale remonte aux travaux de Dai et Parks (Dai and Parks, 1997).

Dans le modèle de (Bassani and A. Needleman, 2001), le module d'écroutissage au niveau du système de glissement $h(\gamma^s, \alpha)$ est une fonction du glissement et d'un invariant α du tenseur densité de dislocations, donc fonction des composantes du gradient de γ^s . La prise en compte plus complète du tenseur densité de dislocations est présentée dans (Acharya and Bassani, 2000). Busso, quant à lui, utilise les relations (VI.37) et (VI.38) en s'appuyant sur les champs de déformation qu'il a déterminés grâce à des calculs par éléments finis. Son modèle est appliqué au cas de monocristaux biphasés de superalliages à base de nickel, comme dans (Forest et al., 2000), puis à des polycristaux de cuivre dans (Cheong et al., 2005).

Dans le cadre de la méthode des éléments finis, l'évaluation du tenseur densité de dislocations à partir du champ de déformation plastique ou des glissements élémentaires pose quelques difficultés. En effet, les glissements n'étant pas des degrés de liberté attachés aux nœuds, l'évaluation des gradients de ces grandeurs nécessite une extrapolation aux nœuds à partir des valeurs aux points de Gauss à l'aide des fonctions d'interpolation, suivie de l'application de la matrice gradient B .

Il s'agit d'une classe de modèles efficaces faisant l'économie de degrés de liberté supplémentaires dans la représentation continue du milieu. Deux difficultés peuvent cependant être relevées :

- Lorsque l'on étudie des problèmes aux limites pour lesquels, dans leur formulation classique, la déformation reste homogène par phase, alors la classe de modèles précédents ne prévoit aucun effet d'échelle puisque les gradients des différentes variables restent nuls. Un tel exemple est donné sur la figure VI.4 issue de (Forest and Sedláček, 2003). Il s'agit de la déformation d'un biphasé composé d'une phase dure (élastique) et d'une phase molle (plastique en glissement simple), soumis à un glissement simple macroscopique avec des conditions aux limites périodiques. La déformation est homogène dans chaque phase. L'absence de conditions à l'interface dans la classe de modèles envisagée dans cette section ne permet pas d'engendrer des hétérogénéités de déformation associées aux empilements de dislocations. Cette situation sera discutée à nouveau ultérieurement. Dans le cas du calcul d'agrégats polycristallins, la déformation est nécessairement hétérogène de sorte que la classe de modèles discutée dans cette section produira systématiquement des effets d'échelle. C'est ce qui explique par exemple la description correcte de l'effet de taille de grain dans les calculs présentés par (Acharya

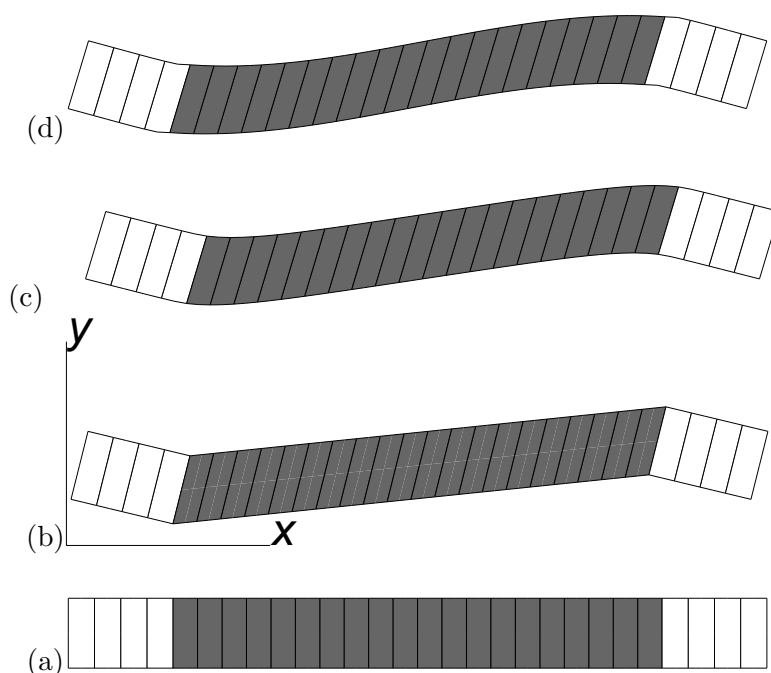


Fig. VI.4 – Modélisation continue du phénomène précédent : alors que le modèle classique fournit la solution homogène par phase (b), la théorie de Cosserat rend compte de l'hétérogénéité dans la phase molle (grise ici), cas élastique, profil en \cosh (c) et élastoplastique, profil parabolique (d). L'état initial est (a) et on applique un glissement simple dans la direction 1, avec des conditions aux limites périodiques.

and Beaudoin, 2000) dans le cas d'un comportement purement viscoplastique.

- Lorsque l'on substitue les relations de comportement dans les équations d'équilibre, la présence des termes en gradient de déformation plastique conduit à des équations aux dérivées partielles en les composantes de déplacement d'ordre supérieur au cas classique. En l'absence de conditions aux limites supplémentaires, le problème est en général mal posé. L'approche est donc critiquable du point de vu mathématique, du point de vu numérique (rien n'assure a priori la convergence des résultats en particulier vis-à-vis du maillage), et du point de vue physique (quel est le sens physique des conditions aux limites implicites?). Les difficultés de ce type d'approche en particulier en présence d'instabilités ont été explorées dans (Niordson and Hutchinson, 2003).

Les limites précédentes incitent à remettre en question la formulation continue elle-même afin d'aboutir à un problème bien posé intégrant l'effet du tenseur densité de dislocations.

VI.3.2 Modèle de Cosserat du monocristal

Les milieux de Cosserat sont des milieux continus généralisés possédant des degrés de liberté de translation (le déplacement classique du point matériel) et de microrotation indépendante de la rotation matérielle. Le lien entre la mécanique de milieux de Cosserat et la plasticité cristalline a été vue dès la fin des années 1950 (Günther, W., 1958). La relation de Nye (VI.26) reliant le tenseur densité de dislocations à la courbure du réseau cristallin est à l'origine du lien entre dislocations et milieux de Cosserat. En effet le gradient de la microrotation représente une courbure dont l'influence sur le comportement mécanique peut être prise en compte. La résistance à la courbure du milieu est due aux couples de contraintes. L'existence de tels couples de contraintes a été envisagée très tôt par MacClintock et Kröner (McClintock et al., 1958; McClintock, 1960; Kröner, 1963). Dans le volume II de

son cours de physique, Arnold Sommerfeld a confié à Kröner la rédaction d'un chapitre sur les liens entre la théorie continue des dislocations et la mécanique des milieux de Cosserat (Sommerfeld, 1978). De tels liens ont été explorés par Mura dans les années 1960 (Mura, T., 1965). La théorie continue des dislocations développée par Kröner et Seeger permet de calculer les champs de contraintes induits par une distribution donnée de dislocations. Il s'agit de problèmes d'élasticité avec champ d'incompatibilité donné. La théorie de la plasticité des milieux de Cosserat représente un moyen de passer de cette théorie continue des dislocations essentiellement statique (où à flux de dislocations donné) à une description dynamique par le biais de lois de comportement.

Cette approche est arrivée trop tôt puisque les équations de durcissement classique du monocristal n'étaient en fait pas encore écrites. Ce n'est qu'au début des années 1970 que les lois de comportement ont été formulées pour le monocristal en grandes transformations en intégrant le durcissement principalement associé aux densités de dislocation statistiquement distribuées (Mandel, 1971; Rice, 1971). Dans son article fondateur de la plasticité anisotrope en grandes transformations, Mandel indique qu'il faudrait traiter le monocristal comme un milieu de Cosserat mais qu'en général on néglige les couples de contraintes (Mandel, 1973). Une telle théorie élastoviscoplastique du monocristal a été formulée dans (Forest et al., 1997). Elle sera présentée au chapitre VII. Elle présente une généralisation de la loi de Schmid en présence de couples de contraintes. Dans ce modèle, l'écroûissage est fonction non seulement du glissement plastique mais aussi de la courbure plastique, i.e. du tenseur densité de dislocations par le biais de la relation de Nye. Le modèle a été appliqué au durcissement par précipitation et à l'effet de taille de grain dans les cristaux CFC (Forest et al., 2000) et au champ en pointe de fissure dans les monocristaux (Forest et al., 2001a).

Une théorie de Cosserat du monocristal a aussi été développée pour la modélisation des bandes de cisaillement dans les monocristaux (Labbé et al., 1998; Kratochvil et al., 1999). La relation suivante d'écroûissage supplémentaire fonction du tenseur densité de dislocations calculé à partir de la courbure du réseau a été proposée :

$$R^G = G^G(\rho^S + \sqrt{\alpha : \bar{\alpha}}) \quad (\text{VI.39})$$

La loi de comportement reliant les couples de contraintes à la courbure adoptée dans (Kratochvil et al., 1999) est la suivante

$$\mu = \frac{2r_0d}{\gamma^s w} l^2 K \quad (\text{VI.40})$$

où d est la distance entre microbandes de localisation, w la largeur de ces bandes, et γ leur intensité en déformation. La longueur l est la taille de l'élément de volume mésoscopique considéré contenant la distribution de microbande. On reviendra sur cette notion de taille d'élément de volume considéré, représentant la résolution spatiale de l'approche continue utilisée.

VI.3.3 Modèle du second gradient du monocristal

Le modèle de Cosserat privilégie la notion de courbure du réseau directement liée au tenseur densité de dislocations par la relation (VI.26). On peut privilégier un autre aspect du tenseur densité de dislocations en considérant les relations (VI.22) et (VI.23). La première relation est une fonction du gradient de la déformation élastique ou, de manière équivalente, de la déformation plastique. Intégrer α dans la modélisation continue de la plasticité cristalline revient donc à faire intervenir le gradient de la déformation plastique, ou au moins une partie de ce gradient. Une telle théorie peut être inscrite dans une modélisation de type second gradient dont le cadre a été posé par Mindlin et Germain (Mindlin and Eshel, 1968; Germain,

1973a). Une théorie du second gradient pour la plasticité du monocristal a été proposée par Fleck, Hutchinson et Shu (Fleck and Hutchinson, 1997; Shu and Fleck, 1999).

Les mesures de déformation d'un milieu du second gradient sont

$$\varepsilon = \frac{1}{2}(\nabla \underline{\mathbf{u}} + (\nabla \underline{\mathbf{u}})^T), \quad \underline{\underline{\mathbf{K}}} = (\nabla \otimes \nabla) \underline{\mathbf{u}} = u_{i,jk} \underline{\mathbf{e}}_i \otimes \underline{\mathbf{e}}_j \otimes \underline{\mathbf{e}}_k \quad (\text{VI.41})$$

La puissance des efforts intérieurs fait intervenir les grandeurs duales que sont le tenseur des contraintes (symétrique) $\underline{\underline{\sigma}}$ et des hypercontraintes S_{ijk} :

$$p^{(i)} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} + \underline{\underline{\mathbf{S}}} : \underline{\underline{\dot{\mathbf{K}}}} \quad (\text{VI.42})$$

où $:$ désigne le produit triplement contracté. L'équation d'équilibre prend la forme

$$(\underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\mathbf{S}}} \nabla) \nabla = 0 \quad (\text{VI.43})$$

Les conditions à la limite font intervenir la dérivée normale à la surface des contraintes et à la courbure de la surface. On les trouvera dans (Germain, 1973a; Shu and Fleck, 1999).

Dans le cas de la plasticité du monocristal, les mesures de déformations sont divisées en parties élastique et plastique :

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^e + \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^p, \quad \underline{\underline{\dot{\mathbf{K}}}} = \underline{\underline{\dot{\mathbf{K}}}}^e + \underline{\underline{\dot{\mathbf{K}}}}^p \quad (\text{VI.44})$$

Les relations d'élasticité font intervenir les modules classiques ainsi qu'un tenseur du sixième ordre des modules généralisés (Mindlin and Eshel, 1968; Germain, 1973a). Fleck, Hutchinson et Shu propose une version simplifiée du tenseur d'ordre 6 d'élasticité faisant intervenir un seul paramètre supplémentaire :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\mathbf{C}}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e, \quad \underline{\underline{\mathbf{S}}} = l_e^2 \underline{\underline{\mathbf{C}}} : \underline{\underline{\dot{\mathbf{K}}}}^e \quad (\text{VI.45})$$

où l_e est une longueur caractéristique d'origine élastique. Les lois d'écoulement plastique sont de la forme

$$\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}^p = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s \underline{\underline{\mathbf{P}}}^s, \quad \underline{\underline{\dot{\mathbf{K}}}}^p = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}_S^s \underline{\underline{\Psi}}_S^s + \dot{\gamma}_T^s \underline{\underline{\Psi}}_T^s + \dot{\gamma}_M^s \underline{\underline{\Psi}}_M^s \quad (\text{VI.46})$$

Le tenseur d'orientation $\underline{\underline{\mathbf{P}}}^s$ a été défini au paragraphe IV.1. Le déploiement du second gradient plastique se fait selon des directions cristallographiques suivantes :

$$\underline{\underline{\Psi}}_S^s = \underline{\underline{\mathbf{l}}}^s \otimes \underline{\underline{\mathbf{P}}}^s, \quad \underline{\underline{\Psi}}_T^s = \underline{\underline{\xi}}^s \otimes \underline{\underline{\mathbf{P}}}^s, \quad \underline{\underline{\Psi}}_M^s = \underline{\underline{\mathbf{n}}}^s \otimes \underline{\underline{\mathbf{P}}}^s \quad (\text{VI.47})$$

Les directions $\underline{\underline{\mathbf{l}}}^s, \underline{\underline{\mathbf{n}}}^s, \underline{\underline{\xi}}^s = \underline{\underline{\mathbf{n}}}^s \wedge \underline{\underline{\mathbf{l}}}^s$ ont été définies aux paragraphes IV.1 et VI.2.1.

La partie plastique du gradient $\underline{\underline{\mathbf{K}}}^p$ contient plus d'informations que le tenseur densité de dislocations. On peut montrer que $\underline{\underline{\Psi}}_S^s$ et $\underline{\underline{\Psi}}_T^s$ et les intensités correspondantes γ_S et γ_T sont associées aux notions de courbure et de torsion du réseau induites par le gradient de glissement dans la direction de glissement (γ_S) et dans la direction tangente (γ_T). Le terme en γ_M correspond à un gradient dans la direction normale au plan de glissement. Il n'est pas lié à une densité de dislocations d'accommodation géométrique.

Les lois d'écrouissage étendues proposées dans (Shu and Fleck, 1999) font intervenir un invariant de la partie plastique du second gradient :

$$\dot{\gamma}_{eq} = (|\dot{\gamma}^s|^p + |l_S \dot{\gamma}_S^s|^p + |l_T \dot{\gamma}_T^s|^p)^{1/p} \quad (\text{VI.48})$$

qui ne prend en compte que la contribution due aux dislocations d'accommodation géométrique. Les lois de comportement viscoplastiques pour $\dot{\gamma}_S^s, \dot{\gamma}_T^s, \dot{\gamma}_M^s$ constituent des

généralisations de loi de Norton de manière similaire à (Forest et al., 1997). Des longueurs caractéristiques l_S et l_T associées aux phénomènes de plasticité sont introduites.

Ce modèle a été utilisé avec succès pour faire des calculs par éléments finis dans des monocristaux poreux et des bicristaux (Shu, 1998; Shu and Fleck, 1999).

Il faut distinguer cette théorie du second gradient du modèle dit en couples de contraintes utilisé par Fleck et Shu pour de nombreuses applications concernant plutôt les polycristaux (Shu and Fleck, 1998).

VI.3.4 Modèles à gradients de variables internes

Les modèles de Cosserat et du second gradient font intervenir des longueurs caractéristiques associés à des mécanismes élastiques et plastiques. Dans de nombreux cas, on peut se contenter d'introduire un seul mécanisme supplémentaire. Une telle approche conduit à hisser certaines variables internes du modèle classique de la plasticité cristalline au rang de degré de liberté supplémentaires : γ^s ou ρ^s par exemple. Il s'agit d'une classe de milieux continus généralisés que l'on choisit d'appeler "milieux à gradients de variables internes". Ces modèles se distinguent de l'approche présentée dans la section VI.3.1-(d) par le fait que des contraintes généralisées sont associées au gradient des variables retenues et introduites dans la puissance des efforts intérieurs (Forest et al., 2002).

a) Modèle d'Aifantis

Le modèle d'Aifantis est l'un des premiers représentants de cette classe de modèles (Aifantis, 1987; Aifantis, 1999). Dans sa version originale, il consiste à introduire le laplacien de la variable interne retenue dans la fonction seuil du modèle de plasticité :

$$R = R^S(\gamma) - c \nabla^2 \gamma \quad (\text{VI.49})$$

pour un système de glissement γ .

Une formulation thermodynamique de ce modèle est possible et montre que l'équation précédente résulte d'une théorie de milieu prenant en compte le gradient $\nabla \gamma$ de la variable retenue. On trouvera cette formulation dans (Fleck and Hutchinson, 2001; Forest et al., 2002). C'est dans cette classe de modèles que s'inscrivent les modèles récents dus à Gurtin (Gurtin, 2002).

b) Modèle de monocristal d'Evers

Le modèle de plasticité cristalline proposé par Evers (Evers et al., 2004) introduit les dislocations d'accommodation géométrique comme degrés de liberté supplémentaires. La loi d'écrouissage phénoménologique intègre à nouveau les résistances au glissement R^S et R^G d'une manière similaire à (VI.37) et (VI.38). L'originalité consiste à introduire une variable d'écrouissage cinématique τ_b . L'évolution du glissement plastique est définie sur chaque système de glissement s et relie l'incrément du glissement plastique $\dot{\gamma}^s$ à la cission résolue effective τ et à la résistance au glissement R^s :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}^s(|\tau_{eff}^s|, R^s) \quad (\text{VI.50})$$

$$\tau_{eff}^s = \tau^s - \tau_b^s \text{ avec } \tau^s \equiv \underline{\sigma} : \mathbf{P}^s \quad \tau_b^s \equiv \underline{\tau}_b : \mathbf{P}^s \quad (\text{VI.51})$$

Le premier terme τ_{eff}^s est la différence entre la cission résolue τ^s et une contrainte cinématique résolue (resolved back-stress) τ_b^s qui représente les interactions à longue distance, caractéristiques des champs de densité de GND. La contrainte interne τ_b^s est donc fonction du gradient de la densité de dislocations d'accommodation géométrique (GND) ρ_G . Le second

terme R^s qui caractérise la résistance au glissement dépend des interactions à courte distance entre toutes les dislocations de quelque nature présente dans le matériau. Alors que la densité de dislocations statistiquement distribuées (SSD) suit une loi d'évolution classique de type "génération-annihilation" de dislocations, issue de la littérature, la densité de GND ρ_G est elle reliée au gradient de glissement $\nabla\gamma^s$ sur chaque système de glissement s :

$$\rho_{G,s} = \rho_{G,s}(\nabla\gamma^s) \quad (\text{VI.52})$$

Une densité de dislocations spécifique aux frontières des grains (densité de dislocations d'interface GBD) est introduite dans le modèle pour rendre compte des incompatibilités de déformations liées au réseau cristallin, près des joints de grains. De part leur "spécificité géométrique", l'influence des GBD est considérée comme identique à celle des GND.

Le modèle est appliqué à un agrégat 2D de cuivre (12 grains, 379 noeuds, 20 degrés de liberté par noeuds c'est à dire 2 déplacements et 18 densités de GND soit au total 7580 degrés de liberté, 4 points de Gauss par élément), avec en plus des noeuds doubles introduits aux joints de grains. Les orientations aléatoires des grains sont identiques pour chaque taille d'agrégat simulé. Quatre tailles d'échantillons sont simulées (1, 2.2, 4.6 et 10 mm) en traction plane. Une répartition de la densité de SSD au cœur des grains et de la densité de GND près des joints de grains est observée. Toutefois, l'évolution de la densité relative de GND reste très faible devant l'évolution de la densité de SSD. Un effet de taille est observé sur l'écrouissage mais également au tout début de l'écoulement plastique à condition toutefois que les GBD soient introduites. L'exposant n de la relation de Hall-Petch ($\sigma(\varepsilon) = \sigma_0(\varepsilon) + k(\varepsilon)d^{-n}$) est égal ici à $3/2$.

VI.3.5 Choix du modèle

Les modèles précédents présentent de nombreuses similarités même si le cadre théorique semble souvent très varié. Cela est dû au fait que le couplage entre écrouissage et tenseur densité de dislocations est systématiquement traduit par une fonction monotone de ρ^G quelle que soit la classe de modèles envisagée. La fonction R^G joue donc un rôle central. On privilégie dans ce travail les approches basées sur les milieux continus généralisés car elles permettent d'aboutir à un problème aux limites en général bien posé et d'éviter les paradoxes dont celui mentionné sur la figure VI.4. Notre attention s'est tournée vers le modèle de Cosserat pour les raisons suivantes :

- C'est le modèle le plus ancien qu'il s'agit de mettre à l'épreuve de la description d'effets d'échelles issus de la métallurgie physique. On dispose en particulier de la modélisation des couples de contraintes par Kröner (Kröner, 1963).
- Le modèle de Cosserat introduit dans sa formulation le champ de rotation du réseau cristallin. C'est un paramètre qui est directement observable expérimentalement. On dispose ainsi d'un élément de validation simulation numérique-expérience direct.
- C'est une approche qui offre une formulation thermomécanique rigoureuse, à la fois en petites et grandes transformations. De même la formulation variationnelle du problème pour sa résolution numérique est clairement établie.
- L'approche de Cosserat se distingue également par une implémentation numérique aisée dans un code par éléments finis. C'est une tâche qui est un peu plus délicate pour les modèles du second gradient mais qui a néanmoins été réalisée avec succès par (Shu et al., 1999; Shu and Fleck, 1999).
- L'argument déterminant est d'ordre pragmatique : le nombre de degrés de liberté supplémentaires est limité à 3 et est indépendant de la cristallographie du système étudié, en particulier indépendant du nombre de systèmes de glissement. Dans un

monocristal cubique centré comme la ferrite traitée au chapitre VIII, les modèles à gradients de densités de dislocations ou à gradients de glissement plastique exigent au moins 24 degrés de liberté supplémentaires puisque 24 systèmes de glissement (voire 48...) doivent être pris en compte, on le verra.

Le passage du modèle discret que représente la dynamique des dislocations (voir pour cet aspect (Fivel et al., 1998)) au modèle continu de plasticité cristalline est aujourd'hui un problème non résolu, sauf dans certaines situations simples de glissement limité à un voire deux systèmes. Une telle méthode d'homogénéisation permettrait de distinguer les différents modèles essentiellement phénoménologiques présentés précédemment. On trouvera toutefois dans (Groma and Voros, 2003) des éléments d'homogénéisation faisant apparaître des termes de gradient du glissement ou de la courbure et indiquant la voie à l'écriture de lois d'érouissage supplémentaires plus réalistes.

Chapitre -VII-

Le modèle de Cosserat du monocristal

Sommaire

VII.1	Cinématique et équations de bilan	57
VII.1.1	Cinématique	57
VII.1.2	Quantité de mouvement et moment cinétique	58
VII.2	Lois de comportement élastoplastique	58
VII.2.1	Hyperélasticité	59
VII.2.2	Plasticité cristalline de Cosserat	59
VII.2.3	Lois d'écroissage	60
VII.3	Signification physique et indications sur la détermination des paramètres du modèle	61
VII.3.1	Signification de la microrotation de Cosserat	61
VII.3.2	Longueur interne liée à l'élasticité de Cosserat	62
VII.3.3	Paramètres liés à la viscoplasticité généralisée	63
VII.3.4	Module d'écroissage supplémentaire dû à la courbure du réseau	63
VII.3.5	Bilan	64
VII.4	Illustration de l'effet de taille de grain prévu par le modèle de Cosserat	65
VII.4.1	Homogénéisation périodique des milieux de Cosserat	65
VII.4.2	Présentation des calculs par éléments finis 2D	66
VII.4.3	Résultats	67

On présente le modèle dans le contexte infinitésimal (petites déformations et petites rotations). Une formulation en grande transformations est donnée dans (Forest et al., 1997).

VII.1 Cinématique et équations de bilan

VII.1.1 Cinématique

Un milieu de Cosserat est un milieu dont l'évolution est caractérisée par un champ de déplacement $\underline{\mathbf{u}}(\underline{\mathbf{x}})$ et un champ de microrotations indépendants l'un de l'autre. La

microrotation est représentée par son vecteur axial $\underline{\Phi}(\underline{\mathbf{x}})$. La microrotation décrit la rotation par rapport à une configuration initiale d'un trièdre de directions orthonormées attaché à chaque point matériel. Ce trièdre est en général formé de vecteurs non matériels. En particulier, la microrotation ne coïncide en général pas avec la rotation matérielle associée à la partie antisymétrique du gradient de la transformation. La signification physique du modèle dépend du choix de ce trièdre directeur et donc du matériau étudié. A partir de ces champs, on définit le tenseur des déformations relatives $\underline{\mathfrak{e}}$ et le tenseur de courbure-torsion $\underline{\kappa}$:

$$\underline{\mathfrak{e}} = \underline{\mathbf{u}} \otimes \underline{\nabla} + \underline{\underline{\epsilon}} \cdot \underline{\Phi} \quad (\text{VII.1})$$

$$\underline{\kappa} = \underline{\Phi} \otimes \underline{\nabla} \quad (\text{VII.2})$$

où $\underline{\underline{\epsilon}}$ représente la signature de la permutation (i,j,k). Dans le cadre de l'hypothèse des petites rotations, $\underline{\underline{1}} - \underline{\underline{\epsilon}} \cdot \underline{\Phi}$ représente le tenseur des petites microrotations. La déformation relative est la différence entre le gradient du déplacement et la microrotation. Il s'agit donc de la déformation vue depuis le référentiel attaché à chaque trièdre directeur. En général, les tenseurs $\underline{\mathfrak{e}}$ et $\underline{\kappa}$ ne sont pas symétriques¹.

VII.1.2 Quantité de mouvement et moment cinétique

On associe aux tenseurs $\underline{\mathfrak{e}}$ et $\underline{\kappa}$ respectivement le tenseur des forces-contraintes $\underline{\sigma}$ et le tenseur des couples-contraintes $\underline{\mu}$. En l'absence de forces et couples volumiques et dans le cas statique, les tenseurs des forces-contraintes $\underline{\sigma}$ et des couples-contraintes $\underline{\mu}$ vérifient les équations d'équilibre :

$$\underline{\sigma} \cdot \underline{\nabla} = 0 \quad (\text{VII.3})$$

$$\underline{\mu} \cdot \underline{\nabla} - \underline{\underline{\epsilon}} : \underline{\sigma} = 0 \quad (\text{VII.4})$$

La notation $\underline{\sigma} \cdot \underline{\nabla}$ désigne la divergence du tenseur $\underline{\sigma}$. Ses composantes sont $\sigma_{ij,j}$. Les tenseurs des forces et couples de contraintes ne sont en général pas symétriques. Les deux équations de champ sont couplées par l'intermédiaire de la partie antisymétrique $\underline{\underline{\epsilon}} : \underline{\sigma}$ du tenseur des forces-contraintes. On renvoie à la référence (Germain, 1973b; Forest, 2001) pour l'établissement de ces relations d'équilibre. La dimension physique du tenseur des contraintes est le pascal (nous utiliserons le mégapascal (MPa) dans la suite). Les couples de contraintes se mesurent en MPa.m.

VII.2 Lois de comportement élastoplastique

Les tenseurs des déformations sont décomposés en parties élastique et plastique :

$$\underline{\mathfrak{e}} = \underline{\mathfrak{e}}^e + \underline{\mathfrak{e}}^p, \quad \underline{\kappa} = \underline{\kappa}^e + \underline{\kappa}^p \quad (\text{VII.5})$$

On décrit successivement les lois de comportement associées à chaque contribution. L'énergie libre Ψ est une fonction des déformation élastiques et de variables internes rassemblées sous le nom q :

$$\Psi(\underline{\mathfrak{e}}^e, \underline{\kappa}^e, q)$$

¹ Afin de préciser les notations, on donne ci-dessous l'expression indicielle des tenseurs de déformations :

$$e_{ij} = u_{i,j} + \epsilon_{ijk} \Phi_k, \quad \kappa_{ij} = \Phi_{i,j}$$

VII.2.1 Hyperélasticité

L'exploitation du second principe de la thermodynamique conduit aux relations d'hyperélasticité :

$$\underline{\sigma} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{e}^e}, \quad \underline{\mu} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\kappa}^e} \quad (\text{VII.6})$$

Dans le cas du comportement élastique linéaire isotrope, on compte six modules d'élasticité. On relie $(\underline{\epsilon}, \underline{\kappa})$ à $(\underline{\sigma}, \underline{\mu})$ par les relations linéaires :

$$\underline{\sigma} = \lambda \operatorname{tr} \underline{e}^e + 2\mu \{ \underline{e}^e \} + 2\mu_c \} \underline{e}^{e\{ \quad \text{et} \quad \underline{\mu} = \alpha \operatorname{tr} \underline{\kappa}^e + 2\beta \{ \underline{\kappa}^e \} + 2\beta_c \} \underline{\kappa}^{e\{ \quad (\text{VII.7})$$

La notation $\{ \underline{\mathbf{f}} \}$ désigne la partie symétrique de $\underline{\mathbf{f}}$ et $\} \underline{\mathbf{f}} \{$ la partie antisymétrique. On retrouve les deux coefficients de Lamé λ et μ classiques, complétés par quatre constantes supplémentaires μ , μ_c , β et β_c . Les modules β, β_c représentent des modules de flexion, et α de torsion. Leur unité est MPa.m². Une longueur caractéristique apparaît donc lorsque l'on forme des rapports de la forme :

$$l_e = \sqrt{\frac{\beta}{\mu}} \quad (\text{VII.8})$$

Dans le cas bidimensionnel, la grandeur α n'intervient pas et on prend en général $\beta = \beta_c$.

VII.2.2 Plasticité cristalline de Cosserat

L'incrément de déformation plastique s'écrit sous la forme d'une contribution des différents systèmes de glissement :

$$\underline{\dot{\epsilon}}^p = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s \underline{\mathbf{P}}^s \quad (\text{VII.9})$$

avec $\underline{\mathbf{P}}^s$, tenseur d'orientation qui a été défini au paragraphe IV.1 :

$$\underline{\mathbf{P}}^s = \underline{\mathbf{l}}^s \otimes \underline{\mathbf{n}}^s \quad (\text{VII.10})$$

Les vecteurs $\underline{\mathbf{l}}^s$ et $\underline{\mathbf{n}}^s$ sont respectivement le vecteur direction de glissement et le vecteur normal au plan de glissement s . La forme de l'incrément de courbure plastique est lui aussi dicté par la cristallographie :

$$\underline{\dot{\kappa}}^p = \sum_{s=1}^N \left(\frac{\dot{\theta}_{\perp}^s}{l_{\perp}} \underline{\mathbf{Q}}^s_{\perp} + \frac{\dot{\theta}_{\odot}^s}{l_{\odot}} \underline{\mathbf{Q}}^s_{\odot} \right) \quad (\text{VII.11})$$

l_{\perp} et l_{\odot} sont des longueurs caractéristiques permettant de définir des angles de courbure $\theta_{\perp, \odot}^s$ à partir du tenseur de courbure. Les tenseurs $\underline{\mathbf{Q}}^s$ sont les tenseurs de torsion-courbure où l'indice \perp désigne la contribution des dislocations coin (flexion de réseau) et \odot désigne la contribution des dislocations vis (torsion de réseau). Si on introduit le vecteur ligne de dislocation coin $\underline{\xi}^s = \underline{\mathbf{n}}^s \times \underline{\mathbf{l}}^s$, les tenseurs de torsion-courbure s'écrivent :

$$\underline{\mathbf{Q}}^s_{\perp} = \underline{\xi}^s \otimes \underline{\mathbf{l}}^s, \quad (\text{VII.12})$$

$$\underline{\mathbf{Q}}^s_{\odot} = \frac{1}{2} \underline{\mathbf{1}} - \underline{\mathbf{l}}^s \otimes \underline{\mathbf{l}}^s \quad (\text{VII.13})$$

Ces relations proviennent de la formule de Nye (VI.26). Dans ce travail, par simplicité, seule la flexion de réseau est introduite. En effet le grand nombre de systèmes de glissement présents

dans matériaux CFC et CC traités dans ce travail permet d'accommoder toute courbure-torsion imposée à l'aide des contributions θ_{\perp}^s . La longueur l_{\perp} sera désignée par l_p dans la suite. On adopte une formulation viscoplastique pour l'expression de l'activation des systèmes de glissement :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - r^s}{k} \right\rangle^n \text{sign } \tau^s \quad (\text{VII.14})$$

On généralise la loi de Schmid et la loi d'écoulement au cas de la courbure plastique associée à chaque système de la manière suivante.

$$\dot{\theta}^s = \left\langle \frac{|\nu^s| - l_{\perp} r_c^s}{l_{\perp} k_c^s} \right\rangle^{n_c} \text{sign } (\nu^s) \quad (\text{VII.15})$$

avec

$$\tau^s = \underline{\mathbf{P}}^s : \underline{\boldsymbol{\sigma}}^s \quad (\text{VII.16})$$

$$\nu^s = \underline{\mathbf{Q}}^s : \underline{\boldsymbol{\mu}}^s \quad (\text{VII.17})$$

où τ^s et ν^s sont respectivement la contrainte résolue et le couple de contrainte résolu sur le système de glissement et de courbure s . Les paramètres k et n peuvent être choisis respectivement petits et grands si l'on souhaite approcher un comportement quasi-indépendant du temps. Les quantités entre crochets doivent être positives pour que les incréments de glissement plastique $\dot{\gamma}^s$ et de courbure plastique $\dot{\kappa}^p$ soient non nuls. Les équations VII.14 et VII.15 correspondent à une loi de Schmid généralisée.

VII.2.3 Lois d'écrouissage

La loi d'écrouissage est la loi non linéaire (IV.3) à laquelle on a ajouté un terme de couplage. Elle s'écrit :

$$r^s = r_0 + R^S + R^G, \quad (\text{VII.18})$$

$$R^S = q \sum_{r=1}^N h^{sr} (1 - \exp(-bv^r)), \quad R^G = R^G(|\theta^s|) \quad (\text{VII.19})$$

$$r_c^s = r_{c0} \quad (\text{VII.20})$$

L'interaction entre les différents systèmes de glissement est introduite par la matrice h^{sr} qui prend en compte l'écrouissage latent et l'auto-écrouissage. L'angle de courbure θ^s est directement relié à la densité de dislocations d'accommodation géométrique par la relation

$$\rho^{G,s} = \frac{\theta^s}{l_p b} \quad (\text{VII.21})$$

Le terme d'écrouissage supplémentaire est une fonction des ρ^G et donc des θ^G . Une forme possible de l'écrouissage supplémentaire R^G est

$$R^G = Q^G \sqrt{\sum_{r=1}^N |\theta^r|} \quad (\text{VII.22})$$

Cette relation, purement phénoménologique, correspond à l'expression (VI.38) avec $p = 1$ et à une matrice d'interaction isotrope $a^{su} = 1$ dans (VI.37). On se réserve toutefois la possibilité de tester d'autres relations lors des applications et des identifications du chapitre VIII.

Dans la relation (VII.22), le paramètre-clef est $Q^G \sqrt{bl_p}$. Il a la dimension MPa.m. En effet, θ^G/l_p est directement reliée à la courbure totale imposée par (VII.11) et la relation (VII.22) s'écrit aussi :

$$R^G = Q^G \sqrt{bl_p} \sqrt{\sum_{r=1}^N |\rho^{G,r}|} \quad (\text{VII.23})$$

C'est le paramètre $Q^G \sqrt{bl_p}$ qu'il s'agira d'identifier dans les applications pratiques.

On pourrait introduire la résistance supplémentaire R^G au niveau d'un écrouissage cinématique comme l'ont proposé (Menzel and Steinmann, 2000; Evers et al., 2004; Groma and Voros, 2003). Dans le cas tridimensionnel et du glissement multiple, les interactions entre les dislocations d'accommodation géométrique et les dislocations mobiles du glissement plastique sont complexes et conduisent sans doute à des contributions de type isotrope et cinématique. On a choisi ici de tester uniquement le cas isotrope.

VII.3 Signification physique et indications sur la détermination des paramètres du modèle

Le modèle de plasticité cristalline de Cosserat dans sa version précédente fait intervenir 9 paramètres supplémentaires par rapport au modèle classique du paragraphe IV.1 :

$$\alpha, \beta, \beta_c, \mu_c, l_p, Q^G, r_{c0}, k_c, n_c$$

On explicite ici la signification physique de ces paramètres et la façon dont ils peuvent être identifiés.

VII.3.1 Signification de la microrotation de Cosserat

Il est temps de choisir la signification physique adoptée pour la microrotation de Cosserat. Dans le cas de la plasticité du monocristal, le trièdre directeur introduit par Mandel est formé de trois directions attachées au réseau cristallin dans sa configuration relâchée. La microrotation $\underline{\Phi}$ décrit la rotation de ce trièdre et représente donc la rotation du réseau cristallin lui-même. Dans le paragraphe IV.1, le taux de rotation du réseau cristallin est défini par

$$\dot{\omega}^e = \dot{\omega} - \dot{\omega}^p \quad (\text{VII.24})$$

$$= \dot{\mathbf{u}} \otimes \nabla - \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s \mathbf{P}^s \quad (\text{VII.25})$$

$$= \dot{\underline{\mathbf{e}}} - \underline{\underline{\mathbf{e}}} \cdot \dot{\underline{\Phi}} - \dot{\underline{\mathbf{e}}}^p \quad (\text{VII.26})$$

On rappelle que la notation $\dot{\mathbf{u}} \otimes \nabla$ désigne la partie antisymétrique du tenseur entouré. Pour que la microrotation de Cosserat s'identifie à la rotation du réseau cristallin, i.e.

$$-\underline{\underline{\mathbf{e}}} \cdot \dot{\underline{\Phi}} = \dot{\omega}^e \quad (\text{VII.27})$$

il faut que

$$\dot{\underline{\mathbf{e}}} - \dot{\underline{\mathbf{e}}}^p = 0 \quad (\text{VII.28})$$

c'est-à-dire

$$\dot{\underline{\mathbf{e}}}^e = 0 \quad (\text{VII.29})$$

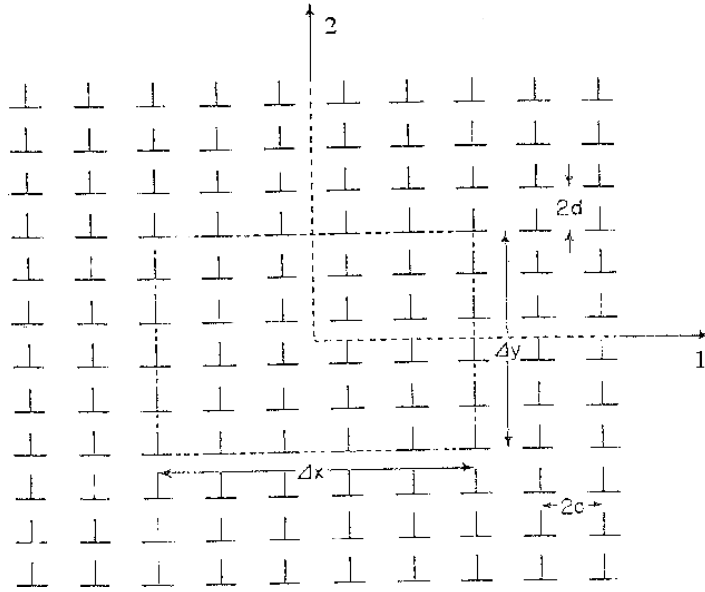


Fig. VII.1 – Schéma d'une densité de dislocations coins : l'arrangement de dislocations dans le volume δV délimité par les pointillés sur le schéma dans le plan (1,2) est stabilisé par les dislocations à l'extérieur de ce volume.

La partie élastique de la déformation relative doit donc être symétrique. Il s'agit d'une liaison interne dans le modèle. Cette liaison interne est traitée par une méthode de pénalisation à l'aide du paramètre μ_c qui pénalise la partie antisymétrique de la déformation élastique dans la loi d'élasticité (VII.7). Dans nos calculs, le paramètre μ_c est pris aussi grand que possible. Ceci garantit que le tenseur des déformations élastiques ξ^e reste quasiment symétrique et donc que les rotations élastiques correspondent bien à des rotations du réseau.

Dès lors, la partie antisymétrique du tenseur des forces-contraintes $\}_{\mathcal{Q}}\{$ représente la réaction associée à la liaison interne (VII.29). Elle est proportionnelle à l'écart aussi petit que possible entre la microrotation de Cosserat et la rotation du réseau cristallin par l'intermédiaire de la loi d'élasticité (VII.7).

VII.3.2 Longueur interne liée à l'élasticité de Cosserat

Les modules de flexion de réseau β et β_c ont été introduits par Kröner (Kröner, 1963). En considérant la rigidité de flexion d'un élément de monocristal contenant un réseau périodique de dislocations-coins du même système, Kröner établit la relation suivante entre couple de contrainte et courbure de l'élément de volume :

$$\mu_{31} = \frac{\pi^2}{6} \frac{\mu}{1-\nu} d^2 \kappa_{31} \quad (\text{VII.30})$$

Les axes sont explicités sur la figure VII.1. La distance entre dislocations est d . Le module de cisaillement classique est μ et le coefficient de Poisson est ν . Ce couple de contrainte représente en fait le couple à appliquer pour que les plans cristallins restent plats en présence de la densité de dislocations d'accommodation géométrique. En faisant l'hypothèse simplificatrice $\beta = \beta_c$ limitant le nombre de paramètres dans la loi d'élasticité isotrope (VII.7), la relation (VII.30) permet d'identifier

$$\beta = \frac{\pi^2}{24} \frac{\mu}{1-\nu} d^2 \quad (\text{VII.31})$$

L'ordre de grandeur de cette rigidité peut être obtenu en prenant par exemple : $\mu = 10^5$ MPa, $d = 10^{-5}$ mm. On trouve alors l'ordre de grandeur

$$\beta = 10^{-5} \text{MPa} \cdot \text{mm}^2 \quad (\text{VII.32})$$

Dans les calculs présentés dans ce travail, la valeur de β a été fixée à $0.001 \text{MPa} \cdot \text{mm}^2$, ce qui correspond à d de l'ordre de 10^{-4} mm.

Par simplicité, la constante α est prise nulle dans ce travail. Un calcul similaire à celui de Kröner dans le cas d'une torsion d'élément de volume monocristallin grâce à des distributions périodiques de dislocations-vis permettrait de déterminer la valeur de α . Ces simplifications $\alpha = 0, \beta = \beta_c$ sont courantes dans les calculs avec les milieux de Cosserat (Borst, 1993).

On rappelle la longueur caractéristique liée à l'élasticité définie au paragraphe VII.2

$$l_e = \sqrt{\frac{\beta}{\mu}}$$

Le module β et, par conséquent, la longueur caractéristique l_e dépendent en fait de la densité de dislocations d'accommodation géométrique via la valeur d introduite par Kröner. Une telle dépendance est aussi indiquée dans la référence (Forest and Sedláček, 2003). Par simplicité, β reste constante dans les simulations présentées dans ce travail.

VII.3.3 Paramètres liés à la viscoplasticité généralisée

Les paramètres intervenant dans les lois de comportement rendant compte de l'écoulement de courbure plastique sont :

$$r_{c0}, k_c, n_c$$

Le seuil r_{c0} dans les équations (VII.15) et (VII.20) détermine l'activation initiale de la courbure plastique. Tant que le couple résolu n'atteint pas cette valeur critique, la courbe est considérée comme purement élastique. Il est délicat de déterminer cette valeur car elle dépend en fait des configurations initiales de dislocations au sein de l'élément de volume. Ce paramètre est pris quasi-nul dans les calculs de ce travail de sorte que l'apparition-même de courbure du réseau se traduit d'emblée par une contribution plastique, i.e. une densité non-nulle de dislocations d'accommodation géométrique. C'est particulièrement important pour la simulation des événements précoces de microplasticité au sein des grains qui déterminent *in fine* la limite d'élasticité apparente macroscopique.

Les paramètres de viscoplasticité k_c et n_c ne jouent guère qu'un rôle de régularisation numérique dans le modèle. Les valeurs retenues sont telles que la plasticité est quasiment indépendante du temps dans les gammes de vitesses simulées.

VII.3.4 Module d'écrouissage supplémentaire dû à la courbure du réseau

Il reste le paramètre-clé du modèle à savoir le module d'écrouissage supplémentaire, $Q^G \sqrt{l_p}$ mentionné au paragraphe VII.2.3. La longueur l_p est en fait conventionnelle dans le modèle : elle sert à définir l'angle de courbure θ^s en fonction de la courbure imposée. Elle représente en principe la taille de l'élément de volume étudié. C'est un peu la limite de résolution spatiale du modèle. En raison du caractère conventionnel de cette définition, la valeur du paramètre $l_p = 1$ mm est utilisée dans les calculs qui vont suivre. Le paramètre essentiel devient alors Q^G qu'il s'agit d'identifier en fonction de l'effet d'échelle étudié.

VII.3.5 Bilan

Au final, deux paramètres jouent un rôle majeur dans le modèle de la plasticité cristalline de Cosserat :

- le module β . Il est associé à une longueur caractéristique l_e qualifiée d'élastique ;
- le module $Q^G \sqrt{bl_p}$ d'écrouissage supplémentaire. On peut définir une longueur caractéristique dit plastique en divisant la quantité $Q^G \sqrt{bl_p}$ par le module plastique classique.

La longueur caractéristique élastique est $l_e = 10^{-7}$ m. Lorsque les dimensions caractéristiques du problème sont de cet ordre, la courbure ne peut pas se développer. On est alors dans la limite du domaine de validité du modèle où un nombre insuffisant de dislocations se développent dans le matériau. On peut définir une multitude de longueurs caractéristiques associées à la plasticité (comme en élasticité d'ailleurs). Elles s'obtiennent en évaluant les rapports des paramètres du modèle. En fait, les longueurs caractéristiques se manifestent lors de la résolution de problèmes aux limites et sont fonction des paramètres introduits. On les met en évidence dans la partie suivante grâce à des simulations par éléments finis.

VII.4 Illustration de l'effet de taille de grain prévu par le modèle de Cosserat

On propose de reprendre les calculs d'agrégats polycristallins présentés dans la première partie de la thèse en substituant le milieu continu classique par le milieu de Cosserat. Les lois de comportement intragranulaires sont alors données par les équations du paragraphe VII.2.2 qui se substituent aux équations de plasticité cristalline classique. Le problème se pose de choisir des conditions aux limites à appliquer à un tel agrégat polycristallin. En particulier, il faut pouvoir imposer une déformation moyenne et calculer des moyennes adéquates pour obtenir la réponse macroscopique. Cela revient à étendre les techniques d'homogénéisation au cas des milieux de Cosserat hétérogènes. La solution utilisée est présentée dans le premier paragraphe. On montre ensuite comment le modèle fonctionne au travers d'exemples bidimensionnels.

VII.4.1 Homogénéisation périodique des milieux de Cosserat

Le polycristal muni des lois de comportement de la plasticité cristalline de Cosserat peut être considéré comme un milieu de Cosserat hétérogène. Certaines méthodes d'homogénéisation ont été étendues au cas des milieux continus généralisés afin de prévoir des effets d'échelle (Smyshlyaev and Fleck, 1994; Smyshlyaev and Fleck, 1996; Xun et al., 2004). Les modèles mentionnés concernent plutôt des estimations ou des bornes du comportement effectif des polycristaux et composites sans passer par le calcul sur un élément de volume représentatif. Il est légitime de se poser les questions suivantes :

- Peut-on homogénéiser les milieux de Cosserat ? Autrement dit, existe-t-il un milieu homogène équivalent ?
- Si oui, quelle est sa nature ? Est-ce un milieu de Cauchy, un milieu de Cosserat ou autre chose ?

En théorie de l'homogénéisation, lorsque l'on n'a pas d'idée préconçue sur les réponses aux questions précédentes, on utilise en général la méthode des développements asymptotiques (Boutin, 1996; Haboussi et al., 2001). La méthode des développements asymptotiques multiéchelles a été mise en œuvre pour les milieux de Cosserat dans (Forest et al., 2001b). On trouve que le milieu effectif peut être un milieu de Cosserat ou un milieu classique à couples de volume selon le rapport entre les longueurs caractéristiques de Cosserat des constituants et la taille des hétérogénéités. L'analyse fournit en particulier le problème aux limites formulé sur une cellule de base périodique. Elle a été menée dans le cadre de l'élasticité linéaire. Dans le cas de la plasticité, on garde la même formulation du problème en introduisant la loi de comportement non linéaire dans le calcul par éléments finis la cellule de base. On rappelle l'approche utilisée dans (Forest et al., 2000) où le cas des polycristaux CFC a été abordé.

Soit V la cellule élémentaire considérée, les champs de déplacement et de microrotation prennent la forme :

$$\mathbf{u} = \underline{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{v}, \quad \underline{\Phi} = \underline{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{x} + \phi \quad (\text{VII.33})$$

Les fluctuations \mathbf{v} et ϕ sont périodiques, c'est-à-dire qu'elles prennent des valeurs identiques sur les couples de points homologues à la frontière de V . Des conditions d'antipériodicité concernent les vecteurs contrainte $\underline{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ et couples de contraintes $\underline{\mu} \cdot \mathbf{n}$. Dans ces conditions, la déformation relative macroscopique de Cosserat est

$$\underline{\mathbf{E}} = \langle \nabla \mathbf{u} \rangle \quad (\text{VII.34})$$

On voit que $\underline{\mathbf{E}}$ n'est pas la moyenne du champ local $\underline{\mathbf{e}}$. Cela vient du fait que, dans l'analyse asymptotique, les contributions locales $\underline{\underline{\epsilon}} \cdot \underline{\Phi}$ sont d'un ordre supérieur à celui du gradient de

u. La courbure moyenne est

$$\underline{\mathbf{K}} = \langle \underline{\kappa} \rangle \quad (\text{VII.35})$$

La condition de Hill–Mandel de la théorie de l’homogénéisation est remplacée par :

$$\langle \underline{\sigma} : \underline{\dot{\mathbf{e}}} + \underline{\mu} : \underline{\dot{\kappa}} \rangle = \underline{\Sigma} : \underline{\dot{\mathbf{E}}} + \underline{\mathbf{M}} : \underline{\mathbf{K}} \quad (\text{VII.36})$$

Les forces et couples de contraintes macroscopiques sont

$$\underline{\Sigma} = \langle \underline{\sigma} \rangle, \quad \underline{\mathbf{M}} = \langle \underline{\mu} + \underline{\epsilon} : \underline{\sigma} \otimes \underline{\mathbf{x}} \rangle \quad (\text{VII.37})$$

Dans ce qui suit, seule nous intéresse la partie classique du milieu effectif. Cela veut dire que l’on appliquera toujours

$$\underline{\mathbf{K}} = 0 \quad (\text{VII.38})$$

La déformation imposée $\underline{\mathbf{E}}$ sera prise symétrique. Les situations envisagées dans les calculs qui vont suivre sont les suivantes :

- dans le cas bidimensionnel (paragraphe VII.4), on a imposé un cisaillement simple moyen :

$$[\underline{\mathbf{E}}] = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{VII.39})$$

- dans le cas tridimensionnel (chapitre VIII), il s’agit d’une traction simple pour laquelle on impose une composante axiale de $\underline{\mathbf{E}}$ et les autres composantes de $\underline{\Sigma}$ sont nulles. Ce sont donc des conditions de chargement globales mixtes qui nécessitent la programmation d’un élément spécifique Cosserat périodique dans le code par éléments finis.

Les éléments de Cosserat périodiques ont été programmés dans le code par éléments finis ZSet/ZéBuLoN ([Z-set package, 2001](#)). Cette programmation est expliquée dans ([Forest et al., 2000](#)). Dans le cas bi–dimensionnel (reps. tridimensionnel), les degrés de liberté (ddl) de chaque nœuds sont les 2 (respectivement 3) ddl de déplacement $\underline{\mathbf{v}}$ et le ddl (respectivement 3 ddl) de microrotation $\underline{\phi}$.

VII.4.2 Présentation des calculs par éléments finis 2D

Pour illustrer les effets de taille de grains simulés à l’aide des milieux de Cosserat, on commence par un exemple simple bidimensionnel (déformations planes) en considérant un agrégat de 9 grains périodiques. Le maillage est représenté sur la figure VII.2. Le choix d’un maillage libre plutôt qu’un maillage régulier s’est présenté ici. La description plus ou moins fidèle de la frontière entre les grains peut en effet perturber les champs près des joints de grains. C’est une comparaison qui a été effectuée par plusieurs auteurs ([Eberl et al., 2002](#); [Kanit et al., 2003](#)), dans le cas de maillages 3D d’agrégats polycristallins. Dans notre cas, le faible coût numérique des calculs 2D, avec une densité de maillage relativement faible, a motivé l’utilisation d’un maillage libre. On est ainsi assuré de décrire au mieux le comportement mécanique notamment près des joints de grains. Les éléments sont des triangles linéaires. L’orientation des 9 grains est choisie de manière aléatoire. Les paramètres matériaux sont ceux de la ferrite monocristalline dont l’identification est présentée au chapitre VIII. Ils sont rassemblés dans la table VIII.3.

L’objectif est de montrer comment le modèle de Cosserat peut conduire à une limite d’élasticité apparente différente pour un même agrégat mais des tailles de grain différentes. On va donc effectuer deux calculs où seule la taille absolue de la cellule varie correspondant

à des taille de grain moyenne de $120\mu\text{m}$ et $5\mu\text{m}$ respectivement. Les orientations des grains et les paramètres matériau sont inchangés. La déformation moyenne appliquée est faible

$$E_{12} = 0.00075 \quad (\text{VII.40})$$

de façon à mettre en évidence la microplasticité qui est l'origine de l'accroissement de limite d'élasticité apparente.

VII.4.3 Résultats

Les figures VII.2, VII.3, VII.4 et VII.5 montrent l'effet induit par la taille de grain sur respectivement sur les champs de déformation plastique cumulée, de rotation du réseau cristallin, de la courbure plastique et le champ de contrainte équivalente de von Mises. Ces résultats ont été présentés dans (Zeghadi et al., 2005a).

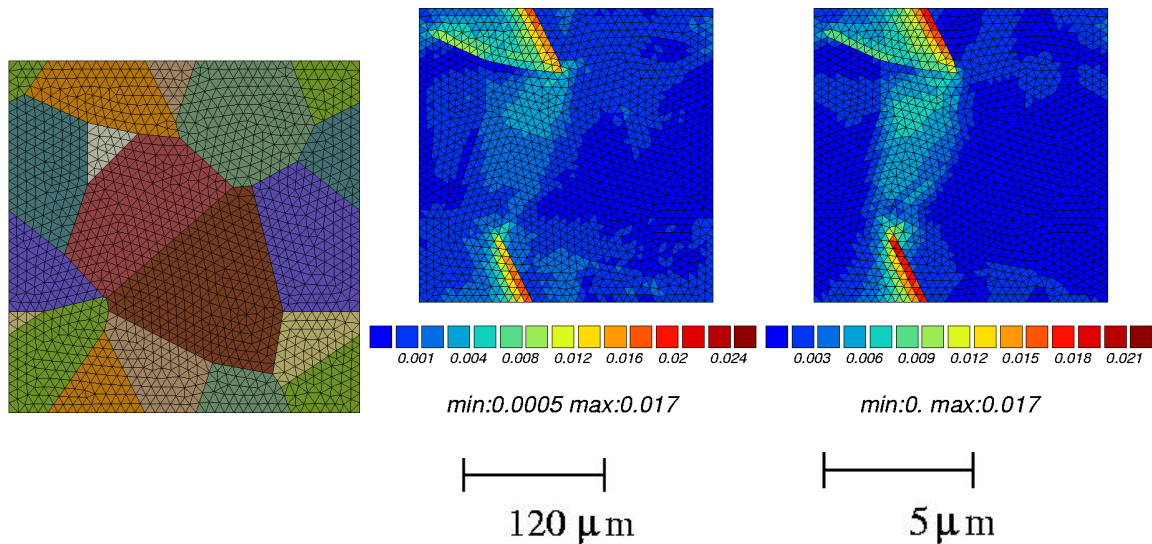


Fig. VII.2 – Résultats de microplasticité : distribution de la déformation plastique cumulée dans un agrégat 2D de ferrite (à gauche) soumis à un cisaillement simple. La déformation moyenne appliquée est $E_{12} = 0.00075$.

Les cartes observées sont celles prises au tout début de l'écoulement plastique à 0.075% de déformation moyenne totale. Les conditions géométriques et cinématiques de périodicité ont été imposées.

a) Champs de déformation plastique

La figure VII.2 montre les cartes de déformation plastique obtenues après un essai de cisaillement sur deux agrégats avec respectivement une taille de grain de $120\mu\text{m}$ et une taille de grain de $5\mu\text{m}$. On observe sur les deux cartes que, à ce niveau de déformation plastique moyenne très faible, les mêmes grains sont activés. Ces grains ont en effet une déformation plastique plus élevée (supérieure à 0.008) par rapport aux autres grains (qui ont une valeur en moyenne égale ou inférieure à 0.001). La déformation plastique est plus élevée près des joints de grains. On distingue donc nettement la forme des joints de grains pour les deux grains qui se sont déformés. On obtient des résultats quasi-identiques pour les deux calculs. Cela signifie que la microplasticité est encore trop précoce pour que les effets de Cosserat associés à la courbure plastique se fassent sentir sur le champ de déformation plastique.

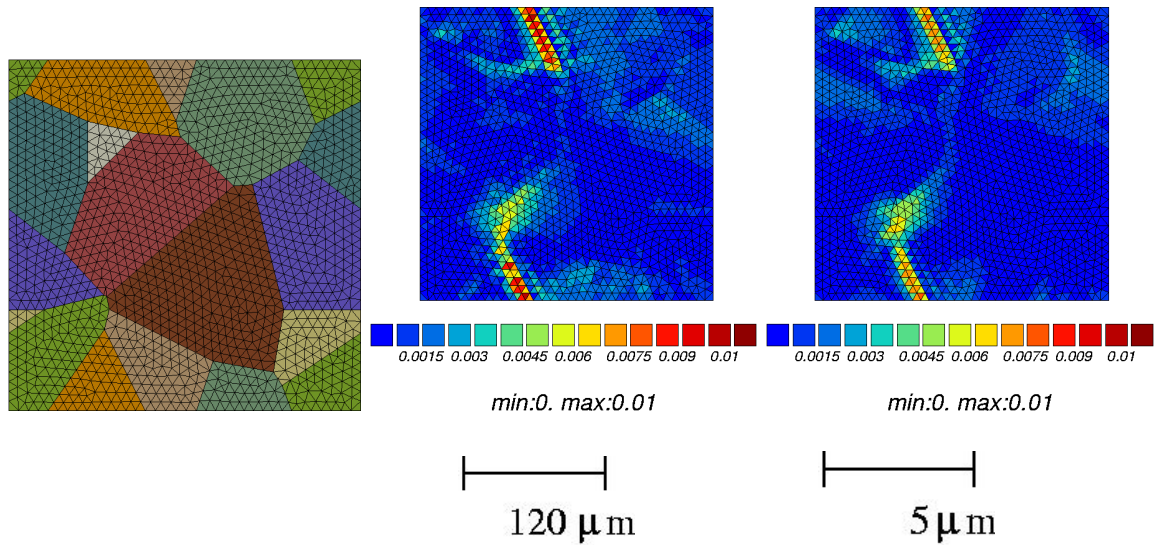


Fig. VII.3 – Résultats de microplasticité : distribution de la rotation du réseau cristallin dans un agrégat 2D de ferrite (à gauche) soumis à un cisaillement simple. La déformation moyenne appliquée est $E_{12} = 0.00075$.

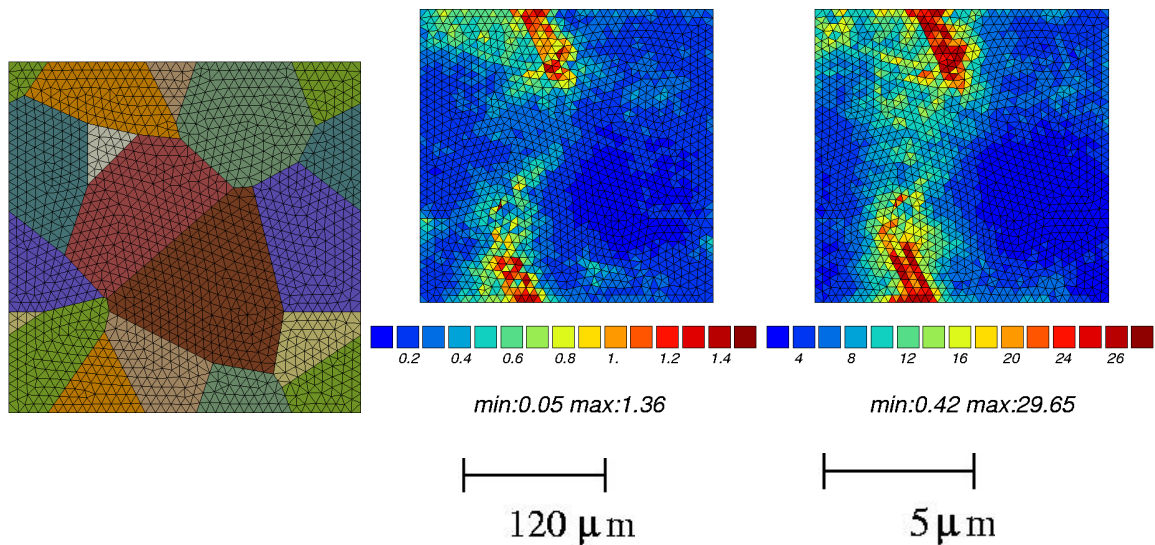


Fig. VII.4 – Résultats de microplasticité : distribution de la norme du tenseur de courbure plastique dans un agrégat 2D de ferrite (à gauche) soumis à un cisaillement simple. La déformation moyenne appliquée est $E_{12} = 0.00075$.

b) Champs de rotation de réseau

La figure VII.3 montre les champs de rotation du réseau cristallin pour les deux agrégats avec respectivement une taille de grain égale à $120\mu m$ et une taille de grain égale à $5\mu m$. De la même façon, c'est toujours dans les deux mêmes grains que la variable observée a des valeurs plus élevées par rapport au reste de l'agrégat, et ce, dans les deux calculs. La rotation de réseau est par ailleurs, particulièrement plus élevée aux joints de grains. Elle est localisée aux mêmes endroits. L'ordre de grandeur de la rotation de réseau (entre 0.34° et égale ou supérieure à 0.57° dans ces deux grains) y est quasi-identique dans les deux calculs ($120\mu m$

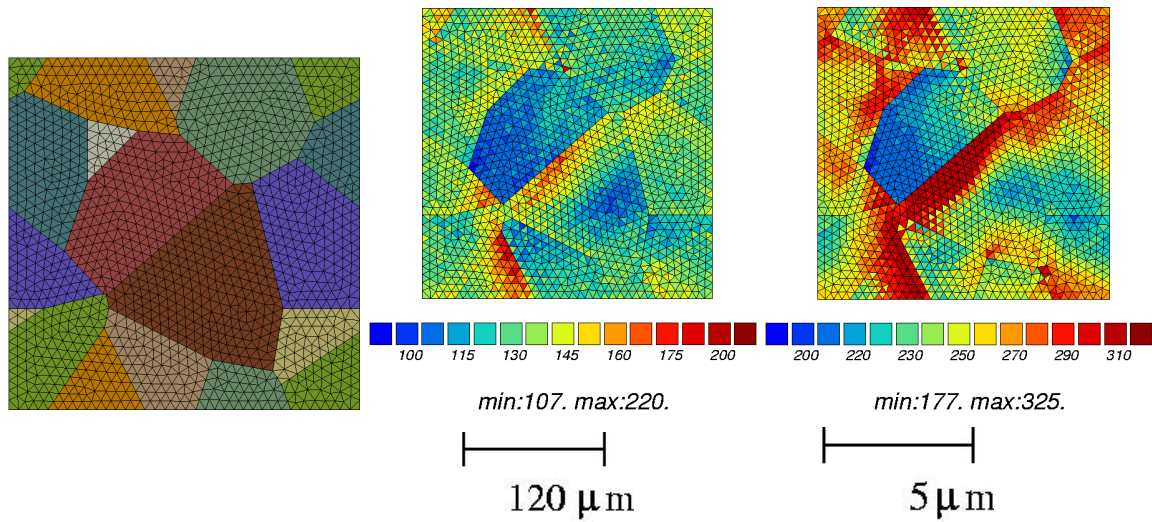


Fig. VII.5 – Résultats de microplasticité : distribution des contraintes locales équivalentes de von Mises dans un agrégat 2D de ferrite (à gauche) soumis à un cisaillement simple. La déformation moyenne appliquée est $E_{12} = 0.00075$.

et $5\mu\text{m}$). Les cartes des champs de rotation de réseau sont donc quasi-identiques pour les deux tailles de grains testées. Cela signifie que la microplasticité est encore trop précoce pour que les effets de Cosserat associés à la courbure plastique se fassent sentir sur le champ de rotation de réseau.

c) Champs de courbure de réseau

Il en va autrement de la courbure de réseau. La figure VII.4 montre la carte de la courbure de réseau qui se développe après déformation dans l'agrégat pour deux tailles de grains différentes. La courbure de réseau maximale est à nouveau localisée dans les mêmes grains et pour les deux calculs. Néanmoins, sa valeur est ici très nettement supérieure pour l'agrégat avec une taille de grain de $5\mu\text{m}$ (courbure de réseau de l'ordre de 26 mm^{-1} dans ces deux grains) que pour l'agrégat avec une taille de grain de $120\mu\text{m}$ (courbure de réseau égale à 1.4 mm^{-1} , toujours dans les deux mêmes grains). Les cartes de la figure VII.4 montrent donc une courbure de réseau qui est beaucoup plus élevée dans les petits grains ($5\mu\text{m}$) que dans les gros grains ($120\mu\text{m}$). C'est un résultat qui était attendu. En effet, la courbure du réseau s'exprime comme le gradient de la rotation de réseau. Or, comme cela a été observé sur la figure VII.3, la rotation de réseau est quasi-identique dans les deux calculs mais la taille de maille est différente. On a donc fort logiquement des valeurs de la courbure de réseau beaucoup plus élevées pour les petits grains. On va voir les conséquences de ce fait sur le champ de contraintes dans le paragraphe d).

L'étendue de la zone de courbure est aussi pilotée par le module de flexion élastique β . Dans les calculs, si l'on considère le cas asymptotique de grains ultra-fins, la courbure ne peut plus se développer en raison de la pénalisation apportée par β et le comportement reste quasiment élastique. La constante β doit rester suffisamment petite pour que cette situation limite ne se produise que pour des tailles de grains suffisamment petites, en particulier, inférieures aux tailles réelles considérées dans la suite, qui restent de l'ordre du μm . Un exemple de l'effet du paramètre β dans le cas d'un agrégat 2D de ferrite est montrés sur la figure VII.6. Les cartes représentent le développement de la courbure de réseau pour deux valeurs de β différentes après un essai de cisaillement à 0.075% de déformation moyenne

imposée. Au tout début de la plasticité, la zone de courbure est beaucoup plus étalée pour la valeur de β la plus élevée.

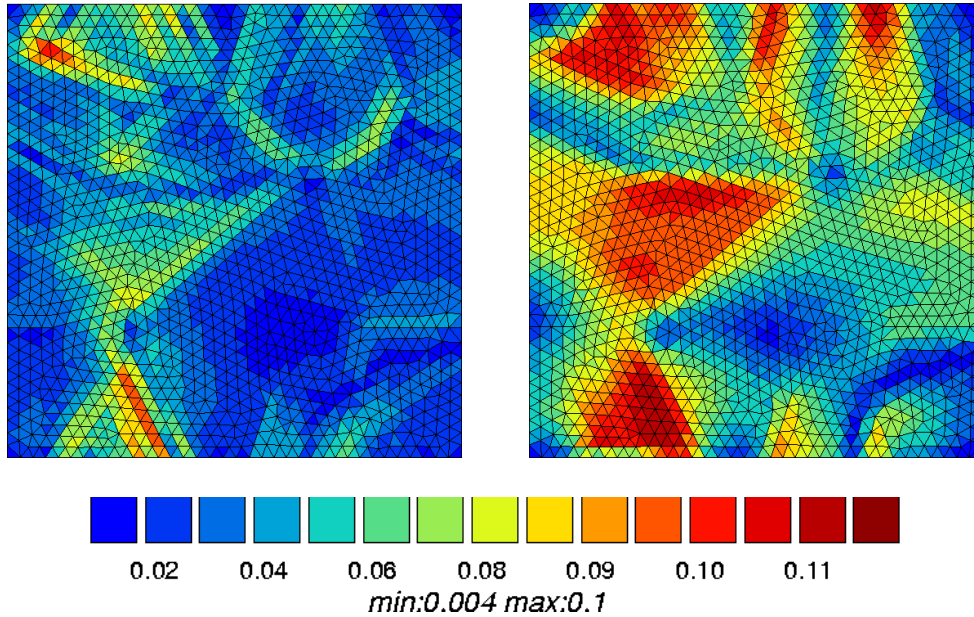


Fig. VII.6 – Distribution de la courbure de réseau (unité mm^{-1}) dans un agrégat 2D (représenté sur à gauche sur la figure VII.2) soumis à un cisaillement simple et au tout début de la plasticité. Les calculs sont réalisés pour deux valeurs différentes du paramètre β qui pilote l'étendue de la zone de courbure dans le modèle : (a) $\beta = 0.001 MPa \cdot mm^2$ (b) $\beta = 10. MPa \cdot mm^2$ après 0.075% de déformation moyenne imposée.

d) Champs de contrainte équivalente de von Mises

On montre donc sur la figure VII.5 des cartes avec des niveaux de contrainte de von Mises nettement plus importants pour l'agrégat avec une taille de grain de $5\mu m$ que pour les grains de $120\mu m$. Ce fort durcissement supplémentaire est dû au terme de couplage de l'équation VII.20. C'est l'origine du durcissement par effet de taille de grain simulé par le modèle. Le seuil de microplasticité, i.e. la valeur r_0 de la cission résolue initiale, est le même quelle que soit la taille de grain. Les champs locaux sont donc comparables au tout début de l'écoulement plastique. En particulier, on a vu que les rotations du réseau cristallin sont quasi-identiques mais que la courbure plastique est très différente, ceci étant dû aux écarts de distances, associés à la coordonnée absolue \underline{x} . La courbure plastique κ^p augmente quand on diminue la taille du grain. Elle s'exprime en fonction du rapport θ^s/l_p dans la relation VII.20. Pour un paramètre l_p constant, la variable θ^s est plus grande dans les petits grains. La contribution $R^G(|\theta^s|)$ devient alors prédominante. Le point clé de l'analyse est le rapport entre la contribution relative du terme $q \sum_{r=1}^n h^{sr}(1 - \exp(-bv^r))$ et du terme $R^G(|\theta^s|)$ dans la loi d'écrouissage VII.20. Quand la taille de grain d est grande, la courbure plastique et donc le terme θ^s sont petits. Le terme de couplage n'a alors qu'un très faible impact. Pour d de l'ordre de l_p ou très petit devant l_p , la contribution des dislocations géométriquement nécessaires devient prédominante. Les effets dus à la courbure plastique affectent non seulement l'écrouissage du matériau mais également la limite d'écoulement plastique. L'effet sur la limite d'élasticité et sur l'écrouissage apparents est d'autant plus fort que Q^G est grand.

Lorsque les niveaux de déformation totale imposée sont plus grands, les champs de

déformation plastique et de rotation de réseau deviennent différents pour les calculs avec $d = 5\mu\text{m}$ et $d = 120\mu\text{m}$ en raison des champs de contraintes devenus très différents.

Chapitre -VIII-

Application aux aciers ferritiques

Sommaire

VIII.1	Présentation du matériau	73
VIII.2	Identification des paramètres	75
VIII.2.1	Paramètres de la plasticité cristalline classique	75
VIII.2.2	Paramètres de l'écroissage dus à la courbure	77
VIII.3	Prévision de l'effet de taille de grain	77
VIII.3.1	Résultats et comparaison avec les résultats expérimentaux	79
VIII.3.2	Diagramme de Hall-Petch	80

VIII.1 Présentation du matériau

Il est rare dans la littérature de trouver le comportement mécanique d'alliages métalliques pour un large spectre de tailles de grain. On a la chance dans la référence (Bouaziz et al., 2001) de disposer des courbes de traction d'aciers IF ferritique pour 6 tailles de grains différentes (voir figure VIII.1). Les tailles de grain les plus fines ont été obtenues pour des nuances différentes de ces aciers. Ces nuances d'acier sont présentées dans la table VIII.1. L'acier est durci par solution solide. Les atomes supplémentaires sont en insertion ou en substitution dans le réseau cristallin. Les éléments d'addition Mn, Si et P sont des solutés substitutionnels. Ils remplacent les atomes de fer sur les sites du réseau cristallin et freinent ainsi le mouvement des dislocations. Les courbes de traction pour ces différents alliages sont données sur la figure

(μm)	Mn	P	Si	Ti	Al	σ_0
120 et 75	100	10	5	50	37	79.
17.5	200	11.2	5	61.3	37	86.
15	201	11.1	5	61.3	37	86.
8.5	199	73.4	5	60.8	37	133.
5.5	1475	68.7	5	60	37	163.

Tab. VIII.1 – Composition chimique des nuances d'acier IF, $10^{-3}\%$ en masse, source ARCELOR Research S.A.

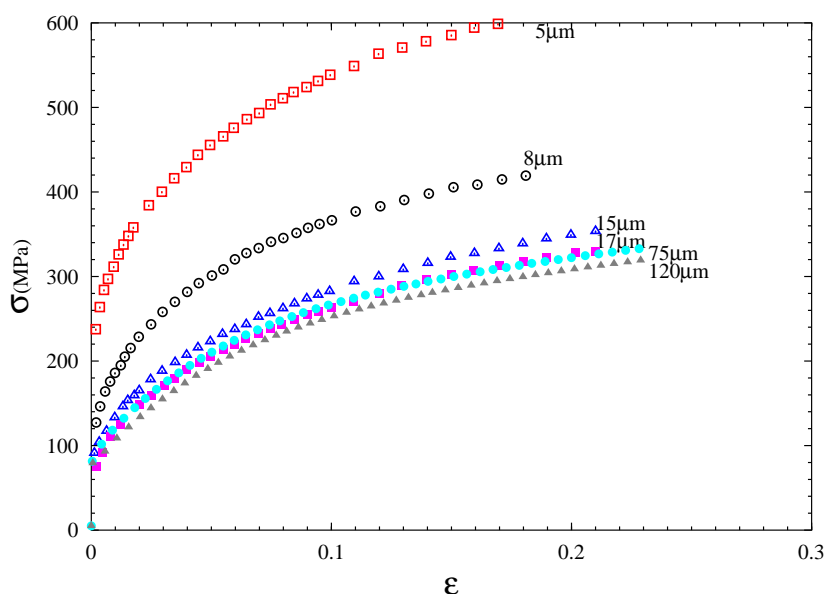


Fig. VIII.1 – Courbes expérimentales d’essais de traction d’un acier IF ferritique pour différentes tailles de grain (Bouaziz et al., 2001).

h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6	h_7	h_8
1.	1.	1.	1.	1.	1.	1.1	1.

Tab. VIII.2 – Valeur des coefficients de la matrice d’interaction h^{sr} de la loi d’écroutissage VII.20.

VIII.1. On constate les niveaux de contraintes très élevés atteints pour les taille de 8 et 5 μm . L’effet de taille sature pour des valeurs de 75 à 120 μm .

La ferrite a une structure cubique centrée VIII.4. Trois familles de systèmes de glissement doivent être à priori prises en compte : $\{110\}\langle 111\rangle$, $\{112\}\langle 111\rangle$ et $\{123\}\langle 111\rangle$. Toutefois, (Hoc, 1999) a supprimé la dernière famille de systèmes en se référant à Franciosi qui interprète le glissement sur les plans $\{123\}$ comme une succession de microglissements sur les plans $\{112\}$ et les plans $\{110\}$. Ce travail s’appuie donc sur cette hypothèse. On considère alors une matrice d’interaction des systèmes de glissement qui se réduit à une matrice 24×24 fournie dans l’annexe D. Les 24×24 coefficients sont 8 constantes indépendantes. La matrice d’interaction h^{sr} représente dans ce travail une version simplifiée du modèle utilisé dans (Hoc et al., 2001) : dans un compromis temps-calcul et pour une très faible variation du résultat, le jeu de coefficients adopté est présenté dans la table VIII.2.

VIII.2 Identification des paramètres

VIII.2.1 Paramètres de la plasticité cristalline classique

Une démarche possible d'identification consiste à faire confiance aux méthodes d'homogénéisation et d'identifier par approche inverse. C'est la stratégie qui a été utilisée dans (Hoc, 1999) et (Paquin, 2001). A partir des résultats d'essais expérimentaux de traction, on identifie les paramètres de la loi de comportement.

a) La méthode d'identification choisie

Différentes méthodes d'identification de modèles de plasticité cristalline ont été proposées durant ces dernières années. Il s'agit dans tous les cas de modèles polycristallins, avec des règles de transition d'échelle de type Berveiller-Zaoui (Berveiller and Zaoui, 1979), le modèle en β (Cailletaud and Pilvin, 1994) ou encore le modèle affine (Masson, 1998). On définit en homogénéisation $\underline{\Sigma}$ et $\underline{\mathbf{E}}$ respectivement la contrainte macroscopique et la déformation macroscopique. Ces grandeurs sont des moyennes sur l'ensemble du volume. En condition de déformation homogène au contour ou contrainte homogène au contour, ces grandeurs macroscopiques sont égales aux valeurs moyennes sur le volume (lemme de Hill-Mandel) :

$$\underline{\mathbf{E}} = \langle \underline{\varepsilon} \rangle \quad (\text{VIII.1})$$

$$\underline{\Sigma} = \langle \underline{\sigma} \rangle \quad (\text{VIII.2})$$

L'objectif du modèle polycristallin est, dans la démarche d'identification, de relocaliser les contraintes et déformations locales par grains, à partir des grandeurs moyennes sur l'ensemble des grains. Sachs et Lin-Taylor ont dans ce but, supposé respectivement que la contrainte et la déformation totale sont égales dans tous les grains, donc égales aux grandeurs moyennes. Kröner (Kröner, 1963) a lui introduit la première formulation de type auto-cohérente (développée en plasticité par Hill (Hill, 1965)) : on résout pour chaque phase le problème comme une inclusion plongée dans une matrice infinie représentant le milieu homogène équivalent (MHE), le MHE ayant les mêmes propriétés que l'ensemble du milieu. C'est une formulation implicite, qui peut être résolue en considérant les contraintes et déformations induites par des déformations libres d'une inclusion élastique dans un milieu homogène également élastique, comme cela a été introduit dans les travaux d'Eshelby. On note $\underline{\underline{\mathbf{S}}}$ le tenseur d'Eshelby (Mura, 1987). On obtient les règles de localisation suivantes :

$$\text{Sachs} \quad \underline{\sigma} = \underline{\Sigma} \quad (\text{VIII.3})$$

$$\text{Lin-Taylor} \quad \underline{\sigma} = \underline{\Sigma} + 2\mu(\underline{\mathbf{E}}_p - \underline{\varepsilon}_p) \quad (\text{VIII.4})$$

$$\text{Kröner} \quad \underline{\sigma} = \underline{\Sigma} + \underline{\underline{\mathbf{C}}} : (\underline{\underline{\mathbf{I}}} - \underline{\underline{\mathbf{S}}}) : (\underline{\mathbf{E}}_p - \underline{\varepsilon}_p) \quad (\text{VIII.5})$$

Les principales formulations que l'on rencontre actuellement ont été en grande partie inspirées par ces travaux. Les extensions suivantes se sont intéressées à considérer le MHE comme un milieu non-linéaire. Comme cela est mentionné plus haut, c'est Hill qui le premier s'y est appliqué. Sa démarche a consisté à suivre un schéma auto-cohérent, avec une formulation incrémentale, valable en élastoplasticité. L'introduction du tenseur $\underline{\underline{\mathbf{L}}}^*$ nécessite la résolution de l'équation implicite :

$$\text{Hill} \quad \dot{\underline{\sigma}} = \underline{\Sigma} + \underline{\underline{\mathbf{L}}}^* : (\underline{\mathbf{E}}_p - \dot{\underline{\varepsilon}}_p) \quad (\text{VIII.6})$$

En viscoplasticité, il est nécessaire de remplacer le module élastique $\underline{\underline{\mathbf{C}}}$ par le module sécant du milieu équivalent $dtenC^s$ ou de considérer une formulation incrémentale qui permet de

$E(MPa)$	ν	$k(MPa.s^{1/n})$	n	$r_0(MPa)$	$q(MPa)$	b
208000.	0.3	0.1	20.	26.	39.	16.

(a)

α	$\beta(MPa.mm^2)$	$\beta_c(MPa.mm^2)$	$l_p(mm)$	$r_{c0}(MPa)$	$Q^G(MPa)$	$k^c(MPa.s^{1/n})$	n_c
0	0.001	0.001	1	0.000001	15	0.01	1

(b)

Tab. VIII.3 – Valeur des paramètres utilisés dans le modèle : la valeur du paramètre r_0 est donnée ici pour une taille de grain de $120 \mu m$ c'est-à-dire celle correspondant à l'identification par rapport au polycristal à gros grains.

transposer les solutions élastiques à chaque incrément (modèles tangents). On introduit alors le module tangent \mathbf{C}^t :

$$\text{sécant} \quad \underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{\mathbf{C}}}^s : (\underline{\underline{\mathbf{I}}} - \underline{\underline{\mathbf{S}}}) : (\underline{\underline{\mathbf{E}}}_p - \underline{\underline{\varepsilon}}_p) \quad (\text{VIII.7})$$

$$\text{tangent} \quad \underline{\underline{\dot{\sigma}}} = d\underline{\underline{ten}}\underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{\mathbf{C}}}^t : (\underline{\underline{\mathbf{I}}} - \underline{\underline{\mathbf{S}}}) : (\underline{\underline{\mathbf{E}}}_p - \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_p) \quad (\text{VIII.8})$$

Le modèle de Berveiller-Zaoui, que l'on utilise ici, fait partie de la classe des modèles sécants (Berveiller and Zaoui, 1979). Le tenseur d'Eshelby y est évalué pour des sphères et le module est estimé pour un matériau plastique isotrope, en élasticité isotrope et à chargement radial. La règle de localisation s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \zeta)\alpha(\underline{\underline{\mathbf{E}}}_p - \underline{\underline{\varepsilon}}_p) \quad (\text{VIII.9})$$

$$\zeta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \text{ et } \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2}\mu \frac{E_{eq}}{\Sigma_{eq}} \quad (\text{VIII.10})$$

b) Résultats de l'identification

En général, ces modèles sont identifiés pour une taille de grain donnée (Fivel and Forest, 2004). Les paramètres du monocristal obtenus ne peuvent donc être utilisés que pour ce type de microstructure. Dans le cas des milieux de Cosserat, on propose d'effectuer cette identification pour des aciers à gros grains. On obtient alors des paramètres proches de ceux du monocristal massif. L'effet de taille viendra lors de l'identification du paramètre de durcissement supplémentaire. On présente ici l'identification des paramètres d'écrouissage classique (R^S) pour le monocristal de ferrite.

L'identification des paramètres du modèle a donc été réalisée par approche inverse, à partir de la courbe expérimentale d'essai de traction du polycristal d'acier IF ferritique à gros grains (taille de grain $120 \mu m$ sur la figure VIII.1). On a en effet considéré ici, à partir des résultats de (Bouaziz et al., 2001) que les courbes de comportement de l'acier IF ferritique convergent pour les tailles de $75 \mu m$ et $120 \mu m$. C'est ce qui nous amène à considérer l'acier à taille de grain de $120 \mu m$ comme l'acier à gros grains. Pour représenter la texture, une distribution aléatoire a été choisie. Les paramètres que l'on identifie par cette approche sont les paramètres r_0 , q et b de l'équation (IV.3). la figure VIII.2 présente le résultat de l'identification. Les coefficients obtenus sont reportés dans la table VIII.3.

c) Effet de durcissement par solution solide

Il est important de pouvoir séparer l'effet de taille de grain proprement dit de celui dû aux changements de composition. Arcelor Research a développé des modèles permettant d'estimer

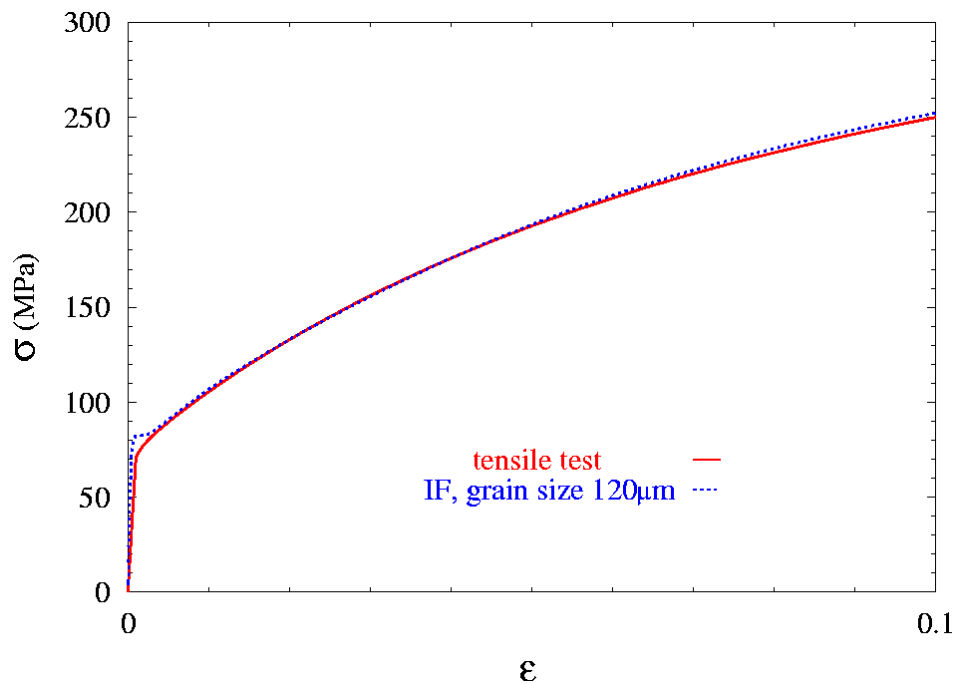


Fig. VIII.2 – Résultat d’identification en traction sur le polycrystal à gros grains (taille de grain égale à $120\mu\text{m}$).

les effets de solution solide (Bouaziz et al., 2001). L’effet de durcissement par solution solide est représenté pour les courbes simulées par le modèle de polycrystal homogénéisé précédent, sur la figure VIII.3. On voit que l’effet de taille de grain est très significatif. L’objectif du chapitre est de rendre compte de cet effet à l’aide de calculs d’agrégats polycristallins de Cosserat.

VIII.2.2 Paramètres de l’érouissage dus à la courbure

Les paramètres de la loi d’évolution non linéaire proposée en VII.20 sont identifiés dans cette partie.

Les paramètres ”de Cosserat” β et Q^G sont identifiés sur en fonction de la dépendance de la courbe par rapport à la taille de grain à partir de simulations par éléments finis 3D, décrites dans la partie VIII.3.1. En particulier, le paramètre Q^G est considéré comme un paramètre matériau et ne variera donc pas d’une simulation à l’autre lorsque l’on changera la taille absolue de l’agrégat. Les paramètres optimisés sont donnés dans la table VIII.3.

VIII.3 Prédiction de l’effet de taille de grain

Des simulations par élément finis 3D sont nécessaires pour prédire l’effet de taille de grain observé expérimentalement sur les aciers IF ferritiques. Les simulations sont réalisées pour des agrégats avec un très petit nombre de grains (10 grains) de façon à n’avoir recours qu’à du calcul séquentiel. Des conditions de périodicité, à la fois pour la géométrie de la microstructure et pour la cinématique sont choisies. Les maillages utilisés sont réguliers avec $8 * 8 * 8$ éléments multiphasés soit 400 points de Gauss par grains. Cela est suffisant pour obtenir une approximation réaliste des gradients de contrainte-déformation dans chacun des grains.

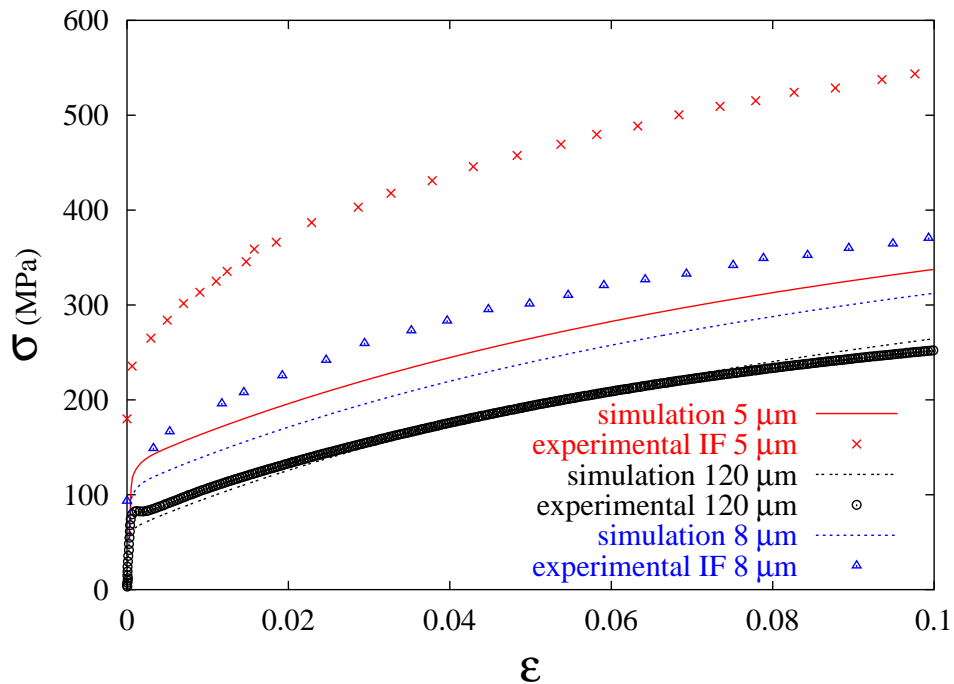


Fig. VIII.3 – Courbes de traction de polycristaux 3D d’aciers IF issues d’essais expérimentaux (en symboles) et de simulations en plasticité cristalline classique (en traits continus). Les courbes expérimentales tiennent compte à la fois de l’effet de durcissement par solution solide et de l’effet de taille de grain. Les courbes issues de la simulation ne prennent en compte que l’effet induit par la solution solide.

Plutôt que de prédire la réponse d’un polycristal à partir d’un très gros volume, (Kanit et al., 2003) a montré qu’il est tout à fait possible de se limiter à de petits volumes avec un petit nombre de grains en utilisant une approche statistique et avec des conditions de périodicité. On réalise alors plusieurs simulations d’échantillons d’agrégats 3D périodiques. Une réponse moyenne, à partir d’un nombre suffisant de réalisations représente alors une estimation de la moyenne d’ensemble de la quantité mécanique étudiée. En raison des temps de calculs importants liés à l’intégration des 48 variables internes par point d’intégration, il n’a pas été possible de considérer plusieurs réalisations. Dans le cas classique cependant (sans effet de Cosserat), on peut montrer que la dispersion obtenue pour différentes réalisations reste limitée, en tout cas lorsque l’on utilise les conditions aux limites périodiques.

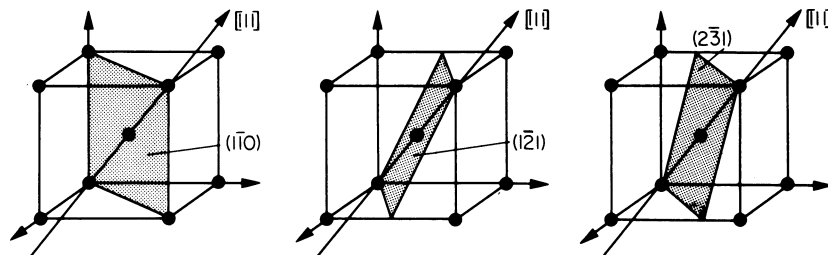


Fig. VIII.4 – Systèmes de glissement dans les structures cubiques centrées (Honeycombe, 1984b).

VIII.3.1 Résultats et comparaison avec les résultats expérimentaux

Les résultats des simulations sont montrés sur la figure VIII.5. On considère des cubes

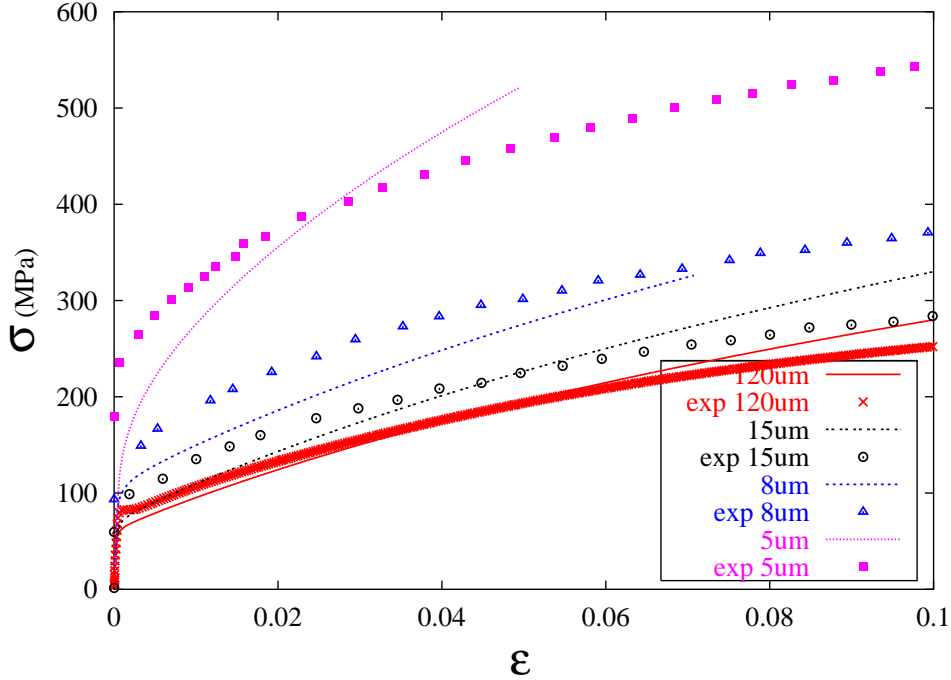


Fig. VIII.5 – Courbes de traction expérimentales (en symboles) et issues de la simulation (en traits continus) d'un agrégat 3D d'acier IF (à gauche sur la figure VIII.6). La déformation moyenne appliquée est $E_{22} = 0.2\%$.

contenant 10 grains périodiques avec exactement la même forme. Une orientation, déterminée de façon aléatoire, est attribuée à chacun des grains. Ce sont les mêmes orientations des grains qui sont prises pour les deux calculs. Le comportement mécanique de chacun des grains est décrit par l'ensemble des équations du modèle de Cosserat en élastoplasticité présenté plus haut. Les tables VIII.3 et VIII.2 donnent les valeurs des paramètres matériau qui ont été utilisés dans les simulations. La taille absolue de l'agrégat et donc par conséquent la taille de grain varie d'une simulation à l'autre. L'effet de durcissement par solution solide est pris en compte dans les calculs (la valeur du paramètre r_0 varie donc d'un calcul à l'autre mais uniquement pour la part de contribution "durcissement solide"). La même déformation moyenne est imposée pour toutes les simulations. La figure VIII.5 donne les valeurs moyennes des déformations et contraintes axiales pour 4 tailles de grain ($5\mu m$, $8\mu m$, $15\mu m$ et $120\mu m$). Pour les petites tailles de grain, le matériau se durcit de façon significative. Pour les grains très petits ($5\mu m$), un très fort durcissement est observé. Ce durcissement supplémentaire est attribué au terme de couplage introduit dans la relation VII.20. Dans tous les cas, les mêmes grains présentent les valeurs maximales pour la variable observée et la contrainte maximale est obtenue près des joints de grains VIII.7 (Zeghadi et al., 2005b).

Pour les paramètres choisis, l'effet de taille de grain sature pour les grains avec une taille supérieure à $120\mu m$ (cas classique) et inférieure à $1\mu m$. Les simulations présentées parviennent à décrire de façon qualitative l'effet de taille de grain observé expérimentalement dans les aciers IF ferritiques. Néanmoins, la figure VIII.5 montre que, confrontées aux résultats expérimentaux, les simulations ne parviennent pas à prédire quantitativement la limite d'élasticité qui reste sous-estimée. Néanmoins, des calculs avec un maillage plus fin permettraient peut être d'obtenir une meilleure prédiction quantitative liée à l'effet de taille.

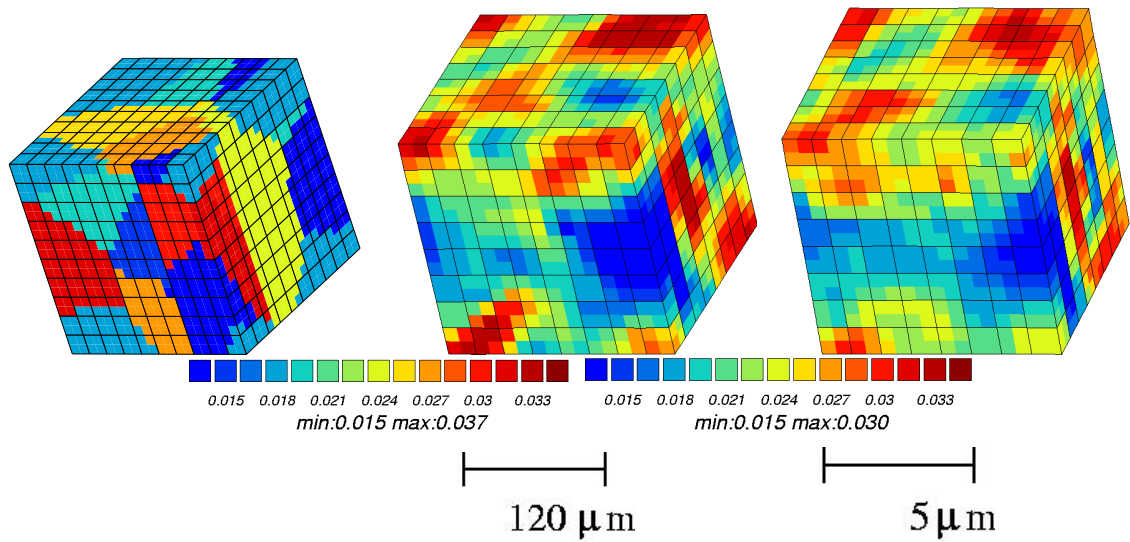


Fig. VIII.6 – Simulations par éléments finis d'un essai de traction d'un agrégat 3D contenant 10 grains : (a) maillage des grains ; (b) et (c) distribution de la déformation plastique cumulée à déformation moyenne imposée $E_{22} = 0.2\%$ pour une taille de grain respectivement égale à $120\mu\text{m}$ et $5\mu\text{m}$. Des conditions géométriques et cinématiques de périodicité sont imposées.

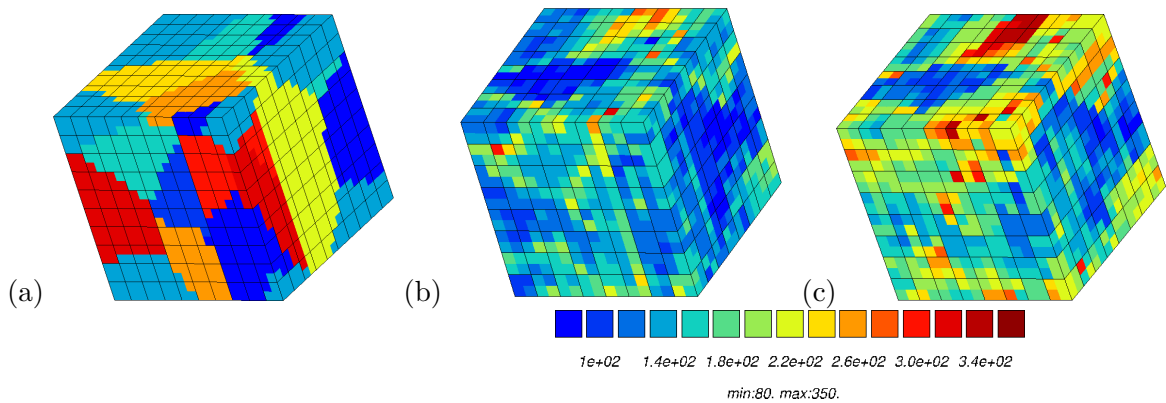


Fig. VIII.7 – Simulations par éléments finis d'un essai de traction d'un agrégat 3D contenant 10 grains : (a) maillage des grains ; (b) et (c) carte des contraintes (unités MPa) après 0.075% de déformation moyenne pour $\beta = 0.001 \text{ MPa}\cdot\text{mm}^2$ pour une taille de grain respectivement égale à $120\mu\text{m}$ et $5\mu\text{m}$. Des conditions géométriques et cinématiques de périodicité sont imposées.

VIII.3.2 Diagramme de Hall-Petch

Les résultats précédents montrent que le modèle de Cosserat prévoit une augmentation de la limite d'élasticité apparente à $E_{22}^p = 0.002$ en fonction de la taille de grain. On a explicité le mécanisme responsable de cet effet dans le paragraphe VII.4. La microplasticité se développe bien avant le seuil apparent. Des courbures importantes apparaissent très tôt dans les petits grains et un durcissement s'ensuit, on l'a vu. Les courbes donnant la limite d'élasticité apparente en fonction de la taille de grain sont données pour la simulation et l'expérience sur la figure VIII.9, pour les 4 tailles de grains testées. On voit que la tendance est bien décrite mais cette limite d'élasticité est sous-estimée par la simulation, en particulier

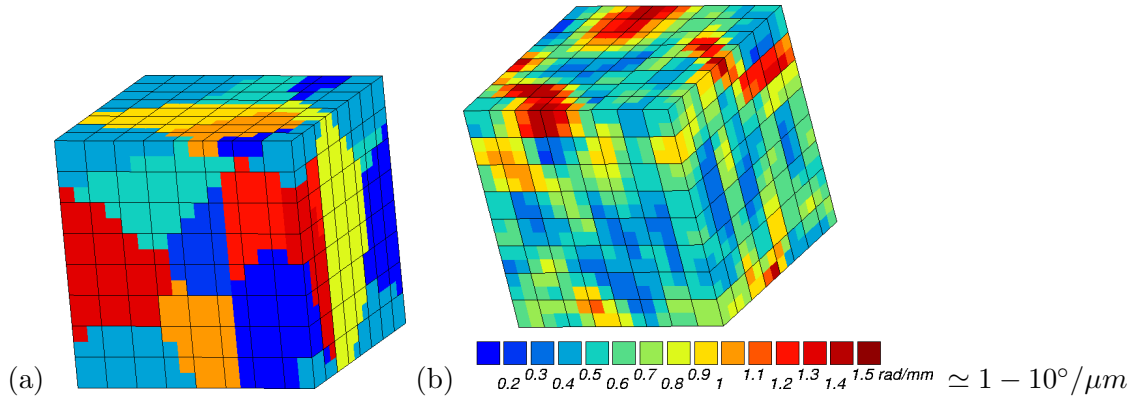


Fig. VIII.8 – Carte de la courbure de réseau (b) dans un acier IF ferritique et maillage associé (a). L'écroissage supplémentaire introduit dans le modèle est le suivant : $R^G = Q^G \sqrt{\sum_s |\theta^s|}$.

pour les faibles tailles de grain ($5 \mu\text{m}$). Notons l'intérêt du résultat de simulation obtenu vis-à-vis des résultats présentés dans la littérature qui prévoient souvent un effet de durcissement sur l'écroissage mais peu sur la limite d'élasticité (Acharya and Beaudoin, 2000; Evers et al., 2004).

Il est utile aussi de tracer le diagramme de Hall-Petch pour déterminer la loi d'échelle obtenue sous la forme

$$\Sigma_{22} = \Sigma_0 + kd^{-n} \quad (\text{VIII.11})$$

Un tel diagramme est donnée sur la figure VIII.10 en ce qui concerne les résultats expérimentaux. L'interprétation est rendue difficile en raison des différences de composition chimique entre les aciers possédant des tailles de grain différentes. L'effet de solution solide a été estimé par ARCELOR, les résultats étant donnés dans la table VIII.1. Ce sont ces valeurs que nous avons utilisées pour Σ_0 . Les pentes obtenues varient entre -0.1 et -0.7, la loi de Hall-Petch prédisant une puissance $n = 0.5$. On n'a pas pu tracer le même diagramme pour la simulation. En effet, en raison du faible nombre de grains considérés, les limites d'élasticité simulées sont trop proches, voire inférieures à Σ_0 . Les volumes considérés ne sont pas encore suffisamment représentatifs.

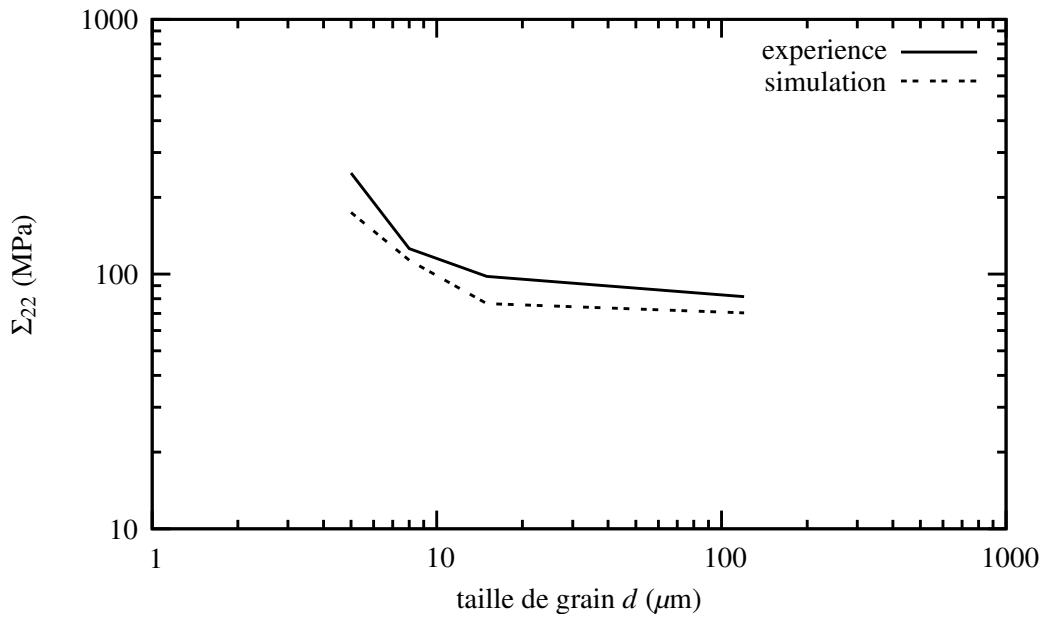


Fig. VIII.9 – Relation entre la contrainte Σ_{22} à déformation plastique macroscopique égale à 0.002 et la taille de grain d pour des essais de traction à déformation moyenne imposée. Quatre tailles de grains ont été testées : 5, 8, 15 et 120 μm . Les résultats expérimentaux sont comparés à la simulation avec les agrégats polycristallins de Cosserat.

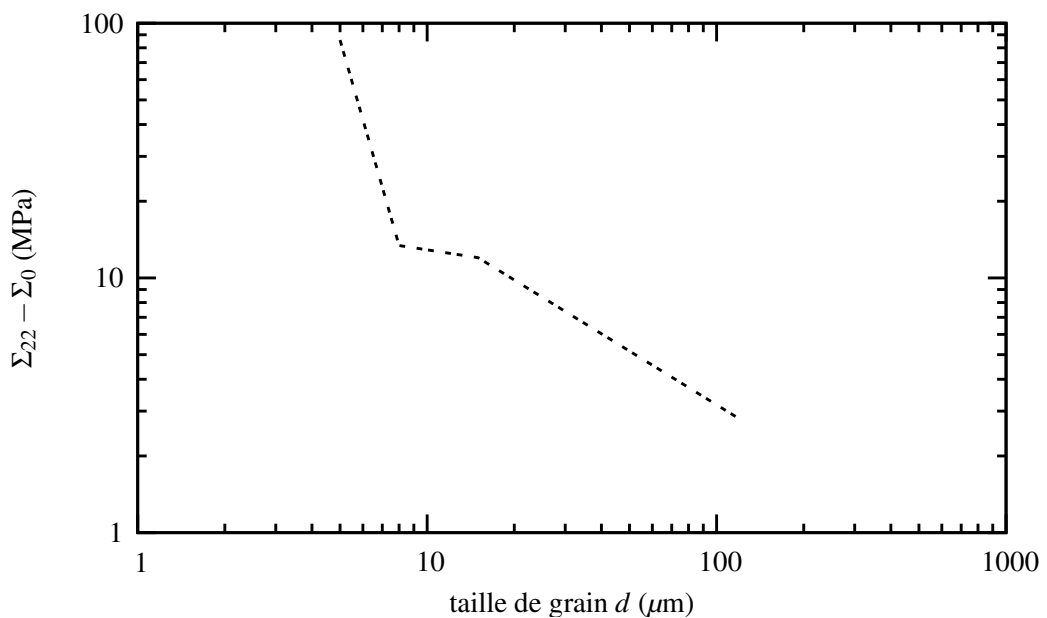


Fig. VIII.10 – Relation entre la contrainte $\Sigma_{22} - \Sigma_0$ à déformation plastique macroscopique égale à 0.002 et la taille de grain d pour des essais de traction à déformation moyenne imposée (résultats expérimentaux). Quatre tailles de grains ont été testées : 5, 8, 15 et 120 μm . Σ_0 représente l'estimation de la contribution de la solution solide à la limite d'élasticité. Ces valeurs sont dans le tableau [VIII.1](#).

Chapitre -IX-

Conclusions et perspectives

Dans cette étude, nous proposons de nouveaux outils pour la modélisation du comportement de polycristaux métalliques élastoplastiques dans le but de prédire des phénomènes physiques observés expérimentalement en métallurgie. On peut ainsi dresser les avancées et donc l'état des possibilités liées au calcul d'agrégats. La méthode permet d'estimer le comportement global et les hétérogénéités de déformation dans des matériaux métalliques. Il a également été montré qu'il est possible d'aborder ces calculs sous un angle statistique. De plus, on a pris en compte, au niveau continu, des densités de dislocations (statistiques et géométriques). Le lien entre la mécanique des milieux continus généralisés et la métallurgie a ainsi été établi. De nombreux résultats sont issus de cette étude :

- Des cartes de moyennes d'ensemble à la surface d'un polycristal ont été présentées pour la première fois, en fonction de multiples microstructures ;
- Une autre contribution a été introduite en dressant des cartes des dispersions d'une grandeur mesurable. On obtient ainsi pour les calculs en élasticité anisotrope des dispersions sur la réponse en contrainte équivalente de l'ordre de 30%. Elles sont, comme cela était attendu, encore plus élevées en plasticité où l'on obtient pour la réponse en glissement plastique cumulé des dispersions supérieures à 150%.
- L'une des conclusions majeures est que cette étude s'inscrit comme un préalable à toute confrontation expérimentale. On a montré qu'il faut nécessairement connaître la morphologie tri-dimensionnelle du polycristal pour toute validation expérimentale locale. Il faut également privilégier les moyennes d'ensemble et ne pas se contenter d'une extrusion ou d'une réalisation unique, fréquemment rencontrée dans la littérature.
- Des effets de taille de grain ont pu également être simulés à l'aide d'un modèle issu de la mécanique des milieux continus généralisés, le modèle de Cosserat
- Le modèle de Cosserat permet de prévoir une limite d'élasticité initiale $\sigma_{0,2\%}$ en fonction de la taille de grain. Ce sont les mécanismes de microplasticité qui sont responsables de cet effet.
- L'érouissage du matériau apparaît néanmoins affecté dans une moindre mesure.

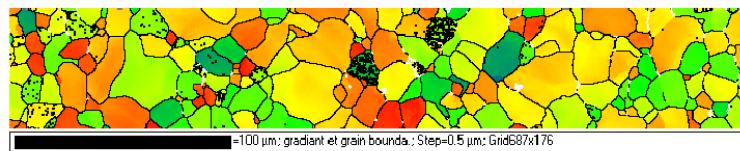
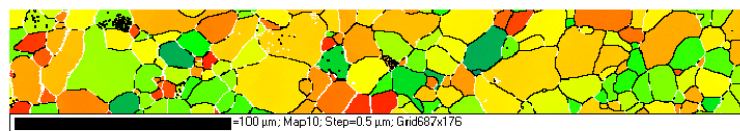
L'accord quantitatif expérience/simulation en ce qui concerne l'effet de taille de grain reste très insuffisant. Plusieurs arguments peuvent être avancés. La densité de maillage utilisée pour les calculs avec le modèle de Cosserat reste trop grossière. Nous sommes limités par le coût des calculs. La sensibilité de la réponse à ce paramètre ne nous permet sans doute ici d'accéder qu'à une partie de l'analyse. Concernant le modèle des milieux de Cosserat

utilisé dans ce travail et la formulation associée présentée au chapitre VII, on propose une loi d'écroutissement supplémentaire qui est le paramètre clef du modèle. Elle est fonction de la courbure du réseau cristallin, liée à la rotation plastique du réseau et qui fait donc intervenir une longueur caractéristique de la microstructure. Cette variable interne est la contribution additive principale à l'écroutissement isotrope sur chaque système de glissement. Dans ce travail, la loi d'écroutissement que l'on propose est fruste. L'effet de taille de grain est en effet encore sous-estimé dans nos résultats. On peut avancer le fait qu'il manque encore des données, issues de la dynamique des dislocations, pour identifier de telles lois. Ces résultats appellent également d'autres analyses notamment au niveau de la loi de Hall-Petch. Suffit-elle comme seule interprétation à l'influence des densités de dislocations d'accommodation géométrique ? C'est faux dans le cas des nanograins, en raison de la rareté des sources de production de dislocations dans les joints de grains. C'est plausible pour les grains ultra-fins (de l'ordre du micron) mais cela n'a pas encore été démontré.

La modélisation des effets d'échelle dans les polycristaux métalliques comporte encore de nombreux enjeux. Ce travail peut être présenté comme une introduction à l'élargissement du dialogue entre la métallurgie physique et la Mécanique des Milieux Continus Généralisés. Parmi quelques perspectives, il est question de :

- Etudier des chargements complexes (cycliques et multiaxial) dans le cas de l'étude de la partie 1. On aurait alors des informations sur les effets liés à l'écroutissement cinématique.
- Confronter les résultats issus de la simulation à des résultats expérimentaux de mesures de champs avec différentes tailles de grain ; On pense ici à la confrontation des champs de courbure à la surface de l'éprouvette pour différentes tailles de grain. Cet élément nous permettrait d'obtenir une relation entre la taille de la zone affectée par la courbure de réseau et la taille de grain ou éventuellement la taille de la microstructure. De telles données existent et l'on montre ici un exemple de cartes des champs de surface sur la figure IX.1 obtenues avant et après déformation et mettant en évidence un développement de la courbure de réseau.

Zone repère A sans déformation



Zone repère A après déformation 5%

Fig. IX.1 – Carte EBSD (Electron Back Scattering Diffraction) des rotations du réseaux avant et après déformation, obtenues après un essai de traction sur une éprouvette d'acier IF, source ARCELOR Research S.A.

- explorer de nouvelles lois d'écroutissement supplémentaires. La démarche peut paraître simple mais il ne faut pas perdre de vue que le développement de telles lois reste

- intimement lié à la réalité physique. Pour l'heure c'est l'une des questions majeures dans cette étude notamment pour des applications à des matériaux multiphasés (dual-phase entre autres) (Bouaziz, 2005).
- développer des modèles simplifiés appliqués pour des biphasés (Bouaziz et al., 2001; Besson et al., 1999) et également en homogénéisation (Bouaziz and Buessler, 2004; Bouaziz, 2005; Xun et al., 2004). C'est ce qui est proposé dans (Bouaziz, 2005) qui suggère de traiter le problème d'une inclusion comportant une zone de cœur dure, une région affectée par le gradient de déformation et une zone non affectée loin de l'inclusion, l'ensemble étant plongé dans un milieu homogène équivalent.

Ce dernier point constitue un pas essentiel pour l'introduction de la modélisation numérique basée sur le calcul de microstructures et la mécanique des milieux continus généralisés auprès des industriels. C'est bien évidemment un enjeu qui sera, pour l'avenir, déterminant. Les capacités numériques croissent en effet de façon considérable et contribuent aussi aux développements de l'industrie métallurgique.

Annexe -A-

Notations

On dresse dans ce qui suit une liste des notations utilisées dans ce mémoire.

A.1 Tenseurs

scalaire (ordre 0)	a
vecteur (ordre 1)	$\underline{\mathbf{a}}$
tenseur d'ordre 2	$\underline{\underline{\mathbf{a}}}$
tenseur d'ordre 3	$\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}$ ou $\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}$
tenseur d'ordre 4	$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{A}}}}}$

Produits contractés : \cdot , \cdot , \cdot , etc.

$x = \underline{\mathbf{a}} \cdot \underline{\mathbf{b}}$	$x = a_i b_i$
$\underline{\mathbf{x}} = \underline{\underline{\mathbf{a}}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{b}}}$	$x_i = a_{ij} b_j$
$\underline{\underline{\mathbf{x}}} = \underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}} \cdot \underline{\underline{\underline{\mathbf{b}}}}$	$x_{ij} = a_{ik} b_{kj}$
$x = \underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}} : \underline{\underline{\underline{\mathbf{b}}}}$	$x = a_{ij} b_{ij}$
$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{x}}}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{A}}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{b}}}}}$	$x_{ij} = A_{ijkl} b_{kl}$
$x = \underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{A}}}}} : \underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{B}}}}}$	$x = A_{ijk} B_{ijk}$

Produit tensoriel : \otimes

$\underline{\underline{\mathbf{x}}} = \underline{\underline{\mathbf{a}}} \otimes \underline{\underline{\mathbf{b}}}$	$x_{ij} = a_j b_j$
$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{X}}}}} = \underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{a}}}}} \otimes \underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{b}}}}}$	$X_{ijkl} = a_{ij} b_{kl}$

Tenseur particulier

$\underline{\underline{\underline{\underline{\mathbf{I}}}}}$ tenseur unité

A.2 Notations de Voigt

Pour noter les tenseurs d'ordre 2 et 4, ainsi que pour les représenter numériquement, on utilise les notations de Voigt qui consistent à noter les tenseurs d'ordre 2 sous forme de vecteurs et les tenseurs d'ordre 4 sous forme de matrice. Pour noter explicitement l'emploi d'une telle notation, on utilisera les conventions suivantes :

tenseur d'ordre 2 $\{\mathbf{a}\}$

tenseur d'ordre 4 $[\underset{\sim}{\mathbf{A}}]$

Les notations de Voigt usuelles distinguent les tenseurs de déformation et de contraintes (cas symétrique) :

$$\varepsilon \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \gamma_{12} = 2\varepsilon_{12} \\ \gamma_{23} = 2\varepsilon_{23} \\ \gamma_{31} = 2\varepsilon_{31} \end{array} \right\} \quad \text{et} \quad \sigma \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \end{array} \right\} \quad (\text{A.1})$$

On peut également utiliser une autre notation permettant de travailler sur l'algèbre des tenseurs d'ordre 2 symétriques :

$$\mathbf{a} \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} a_{11} \\ a_{22} \\ a_{33} \\ \sqrt{2}a_{12} \\ \sqrt{2}a_{23} \\ \sqrt{2}a_{31} \end{array} \right\} \quad (\text{A.2})$$

Cette solution permet d'avoir une notation uniforme. On vérifie en outre que :

$$\mathbf{a} : \mathbf{b} = \{\mathbf{a}\} \cdot \{\mathbf{b}\} \quad (\text{A.3})$$

Annexe -B-

Construction of synthetic tridimensional microstructures

The construction of the aggregates presented in the first part of the thesis is decomposed into 3 main stages :

- the first one is the creation of the first layer of the volume, which includes the reference surface ;
- the second stage is the classical realization of a Voronoi polyhedra aggregate ;
- and the third stage lies in the combination of the two previous volumes.

The construction algorithm is proposed in figure B.1. The first layer is constructed section by section using an iterative process, beginning with the reference surface which will be the same for all realizations. Each grain is considered individually and can expand (see figure B.5) or erode (see figures B.2 and B.3). A random process is introduced to convex grains in these stages (as shown in figure B.4). The grain size is controlled through the growth rate. The first layer is thus constructed. An example can be seen in figure B.6. This technique is quite time consuming, that is why the rest of the volume of the aggregate is constructed using a classical Voronoi scheme. The first layer is considered as a big germ. Other germs are implanted in the left volume with the same density as the first layer in order to obtain the rest of the aggregate (see figure B.7). A comparison between both grain size distribution histograms in figure B.8 shows that the distributions of the classical Voronoi and the synthetic original grains construction are similar. We can then conclude that no bias linked with this process has been introduced.

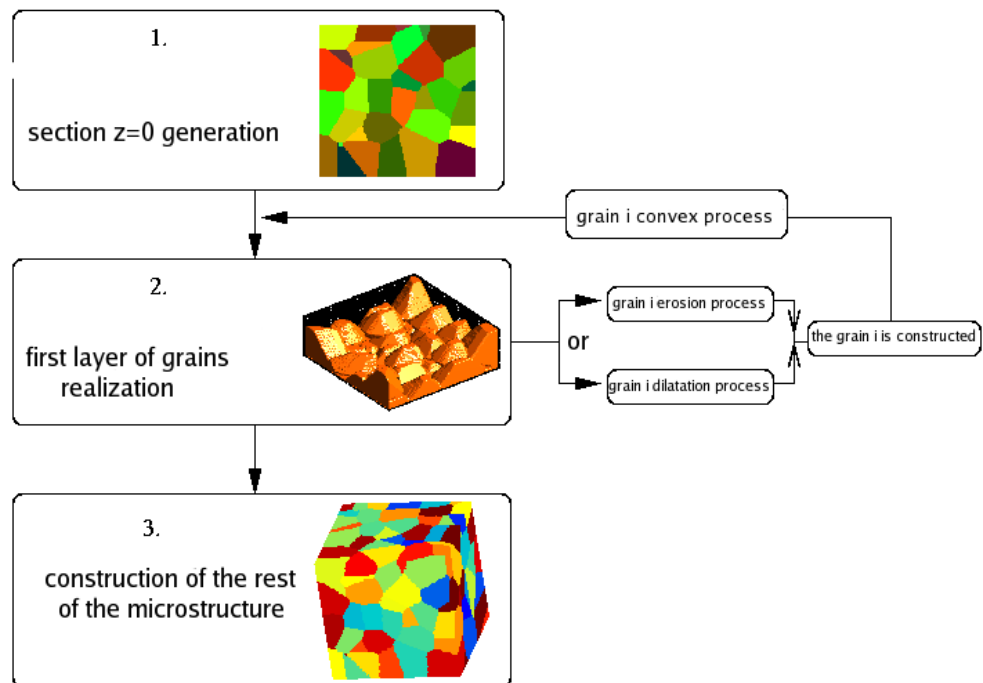


Fig. B.1 – general construction process of the synthetic aggregates with a fixed surface

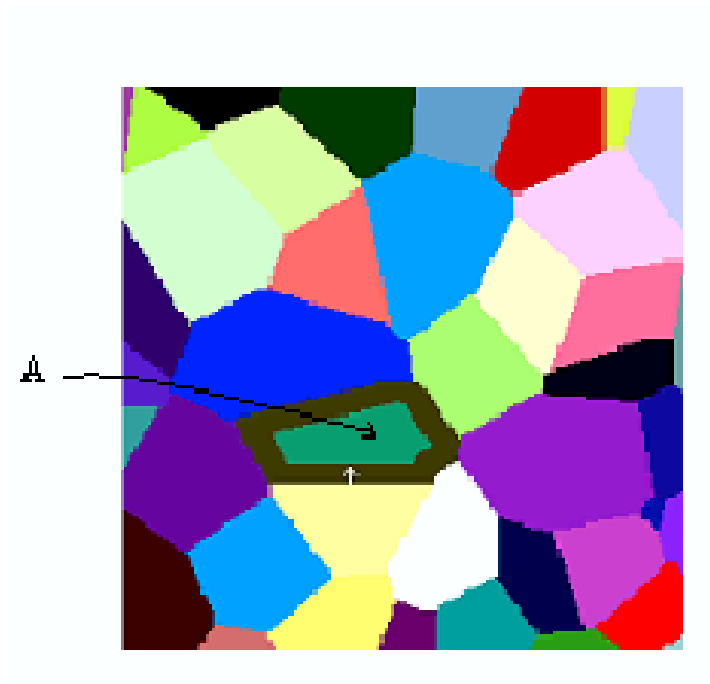


Fig. B.2 – The grain noted A has been eroded. The free space around it will be filled in using an expansion process of its neighbour grains

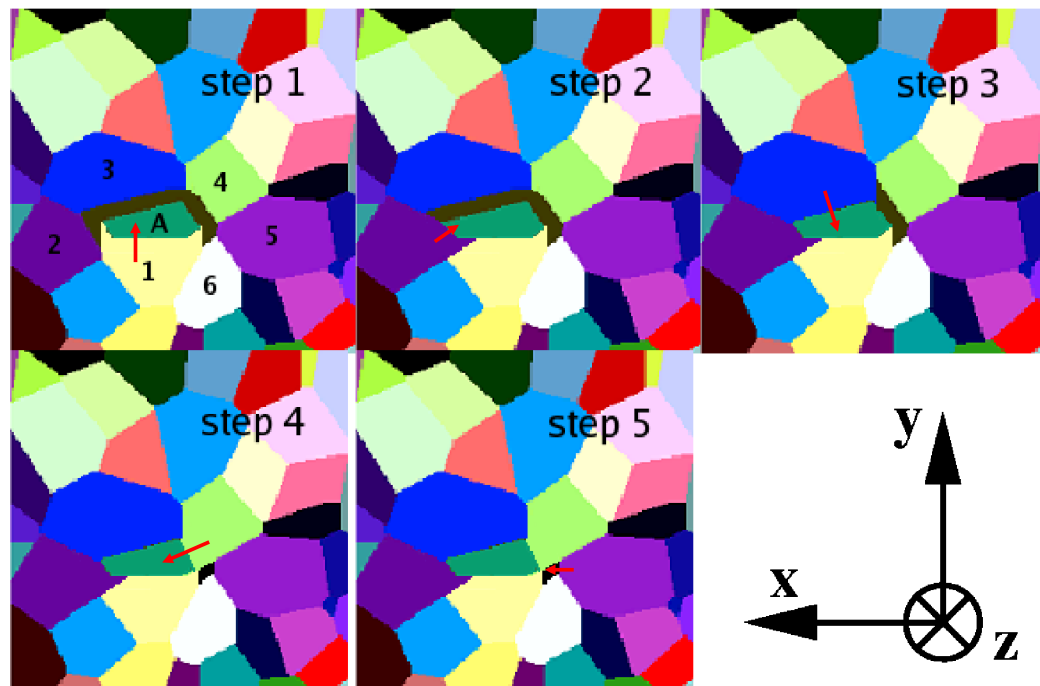


Fig. B.3 – The same section is shown in this figure. The process applied on this section is developed, step by step. The free space is filled in, making growing the neighbour cells, one by one. It is illustrated here for the free space (shown in black color) around grain A (defined in figure B.2). In the first step, grain 1 grows until it reaches grain A boundary. This process pursues step by step, for grains 2, 3 and finally 4. Grains 5 and 6 remains fixed. A new grain (in black in the figure) is thus created in step 5 between grains 1, A, 4, 5 and 6.



Fig. B.4 – Last step of the process detailed in figure B.3 : the new grain created is noted grain 7 and grains A, 2 and 3 has been convexed

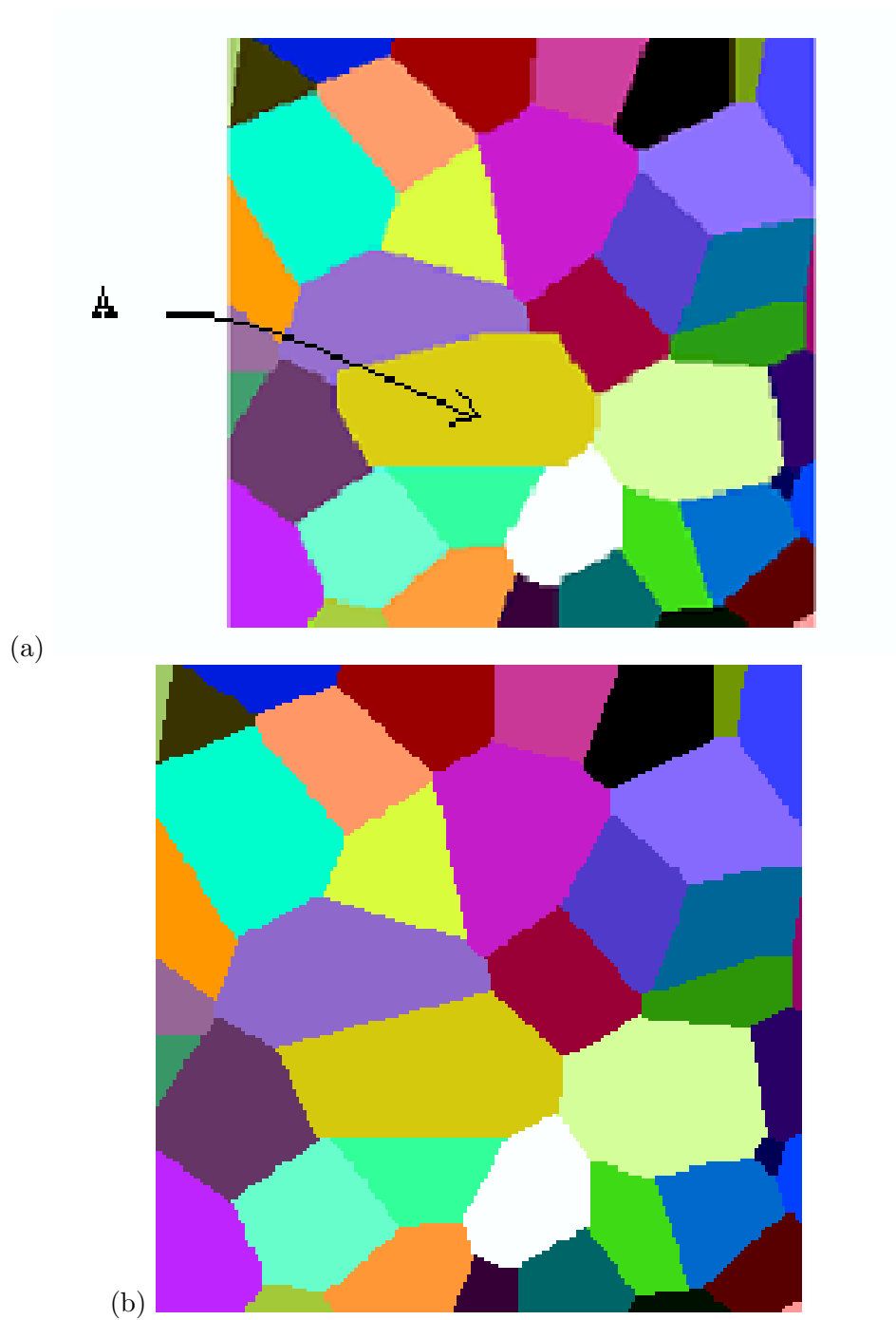
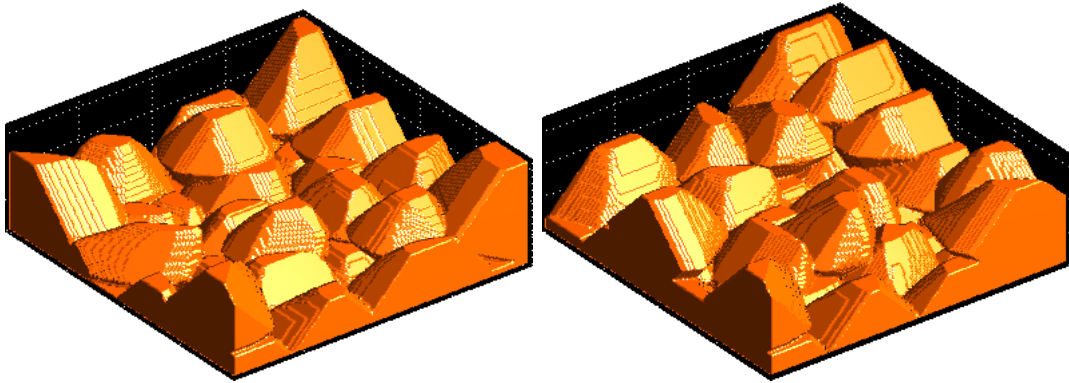


Fig. B.5 – (a) Step 1 : example of the dilatation process of grain A. (b) Step 2 : result obtained after a convex process of grain A



(a) First layer of the first realization

(b) First layer of the second realization

Fig. B.6 – First layer for two different realizations. The first section (section $z = 0$) is the same for both realizations. One can see that the grain geometry is very different from realization to another.

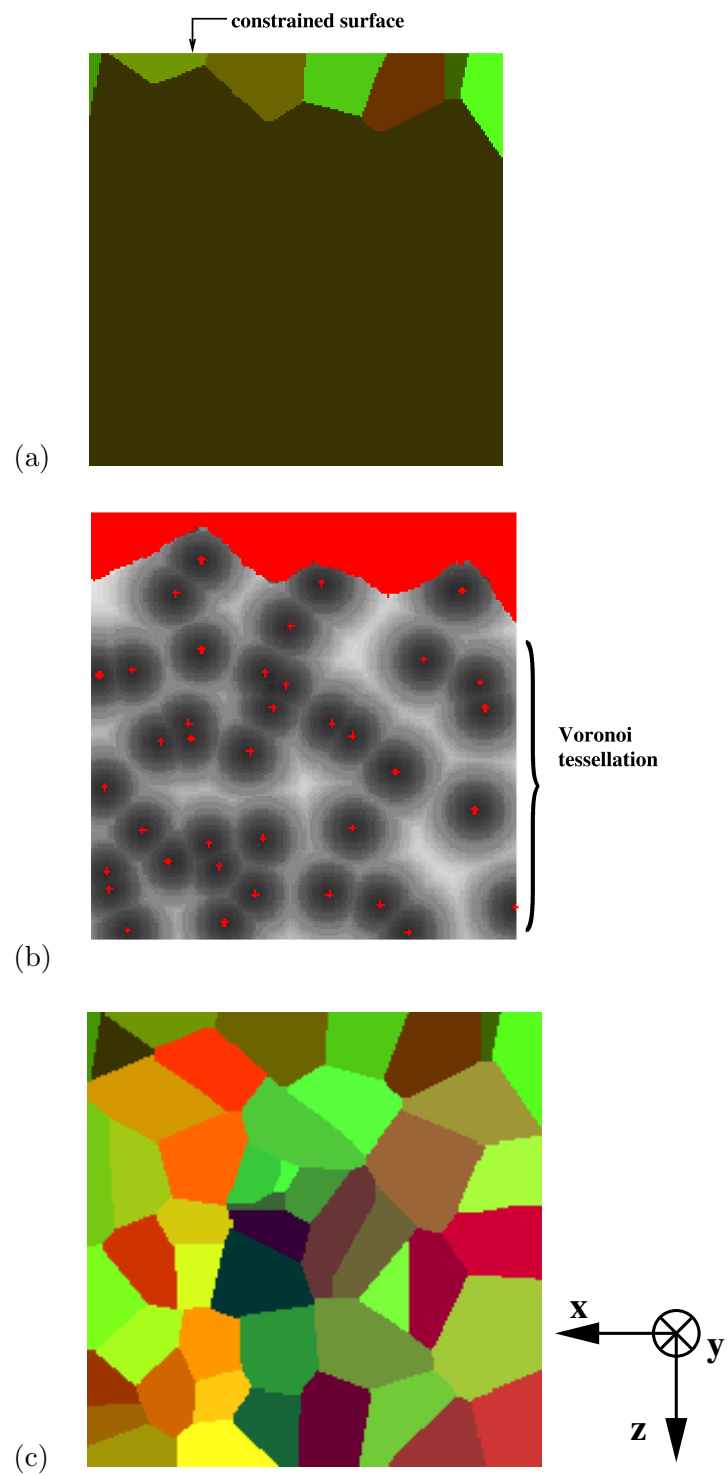


Fig. B.7 – (a) section of the first layer of grains on the top with the free volume beneath (b) section of the Voronoi germ implantation (c) section of the resulting aggregate after growth

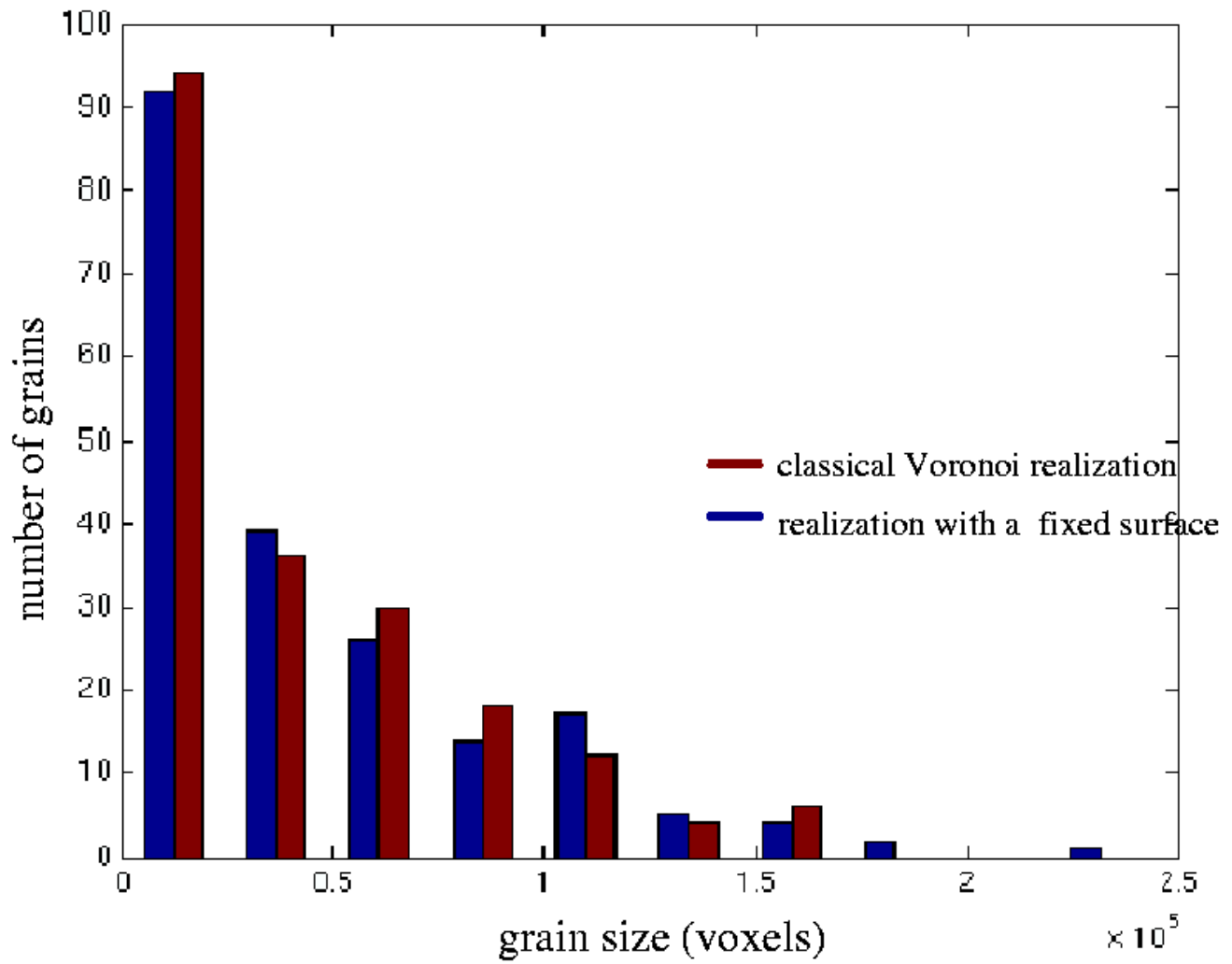


Fig. B.8 – Grain size distribution : comparison between the classical Voronoi realization and one realization with the same reference surface proposed in this work.

Macroscopic behaviour curves

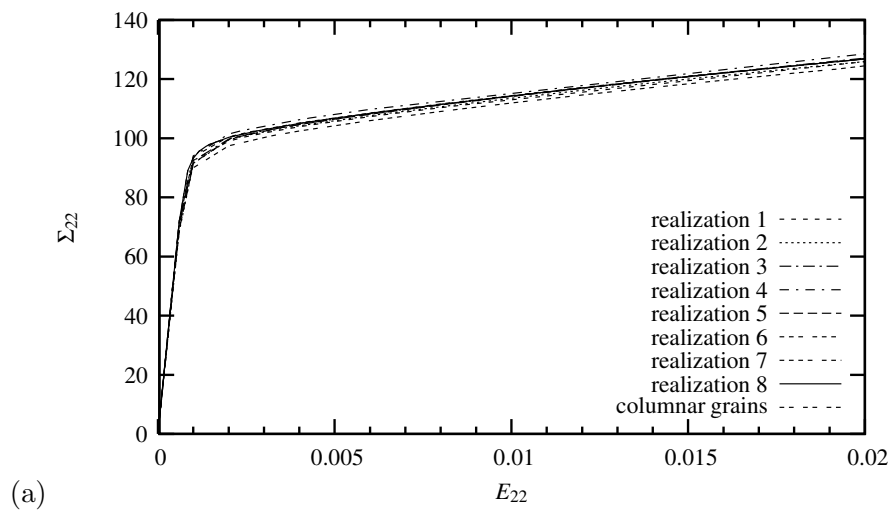


Fig. C.1 – Macroscopic stress-strain curves for different realizations in elastoplasticity

Bibliographie

- Acharya, A. and Bassani, J. (2000). Lattice incompatibility and a gradient theory of crystal plasticity. *J. mech. phys. solids*, 48 :1565–1595.
- Acharya, A. and Beaudoin, A. (2000). Grain-size effect in viscoplastic polycrystals at moderate strains. *J. Mech. Phys. Solids*, 48 :2213–2230.
- Aifantis, E. (1987). The physics of plastic deformation. *International Journal of Plasticity*, 3 :211–248.
- Aifantis, E. (1999). Gradient deformation models at nano, micro, and macro scales. *J. Engng Mat and Technol.*, 121 :189–202.
- Arsenlis, A. and Parks, D. (1999). Crystallographic aspects of geometrically-necessary and statistically-stored dislocation density. *Acta Mater.*, 47 :1597–1611.
- Asaro, R. (1983). Crystal plasticity. *J. Appl. Mech.*, 50 :921–934.
- Ashby, M. (1970). The deformation of plastically non-homogeneous alloys. *Phil. Mag.*, 21 :399–424.
- Barbe, F., Forest, S., and Cailletaud, G. (2001). Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 2 : Results. *Int. J. Plasticity*, 17 :537–563.
- Bassani, J. and Needleman, E. v. d. G. (2001). Plastic flow in a composite : a comparison of non local continuum and discrete dislocation predictions. *Int. J. Solids Structures*, 38 :833–853.
- Becker, R. (1991). Analysis of texture evolution in channel die compression.i. effects of grain interaction. *Acta Metall. Mater.*, 39 :1211–1230.
- Becker, R. and Panchanadeeswaran, S. (1995). Effect of grain interactions on deformation and local textures in polycrystals. *Acta Metall. Mater*, 43 :2701–2719.
- Becker, R. and Richmond, O. (1994). Incorporation of microstructural geometry in material modelling. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2 :439–454.
- Berveiller, M. and Zaoui, A. (1979). An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystal. *J. Mech. Phys. Sol.*, 26 :325–344.
- Besson, J., Bultel, F., and Forest, S. (1999). Plasticité des milieux de cosserat. application aux composites particuliers. *4ème Colloque en Calcul des Structures, CSMA/Teksea, Toulouse*, pages 759–764.
- Bhattacharyya, A., El-danaf, E., Kalidindi, S., and Doherty, R. (2001). Evolution of grain-scale microstructure during large strain simple compression of polycrystalline aluminium with quasi columnar grains : OIM measurements and numerical simulations. *Acta Metall. Mater*, 17 :861–883.
- Borst, R. D. (1993). A generalization of j_2 -flow theory for polar continua. *Computer Methods in Appl. Mech. and Engng.*, 103 :347–362.
- Bouaziz, O. (2005). *Relations microstructures-comportement des aciers et couplage avec les évolutions métallurgiques*. habilitation à diriger des recherches, Université de Metz.

- Bouaziz, O. and Buessler, P. (2004). Iso-work increment assumption for heterogeneous material behaviour modelling. *Adv. Eng. Mat.*, 6 :79–83.
- Bouaziz, O., Iung, T., Kandel, M., and Lecomte, C. (2001). Physical modelling of microstructure and mechanical properties of dual-phase steel. *J. Phys. IV*, 11 :223–231.
- Boutin, C. (1996). Microstructural effects in elastic composites. *Int. J. Solids Structures*, 33 :1023–1051.
- Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, V., and Quilici, S. (2003). Some elements of microstructural mechanics. *Computational Materials Science*, 27 :351–374.
- Cailletaud, G. and Pilvin, P. (1994). Utilisation des modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Eléments finis*, 3 :515–541.
- Cheong, K., Busso, E., and Arsenlis, A. (2005). A study of microstructural length scale effects on the behavior of FCC polycrystals using strain gradient concepts. *International Journal of Plasticity*, 21 :1797–1814.
- Dai, H. and Parks, D. (1997). Geometrically-necessary dislocation density and scale-dependent crystal plasticity. In Khan, A., editor, *Proceedings of Plasticity '97*, pages 17–18. Neat Press, Fulton, Maryland.
- Decker, L. and Jeulin, D. (2000). Simulations 3d de matériaux aléatoires polycristallins. *Revue de Métallurgie, CITScience et Génie des Matériaux*, pages 271–275.
- Delaire, F., Raphanel, J., and Rey, C. (2000). Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension : experimental study and finite element simulations. *Acta Mater.*, 48 :1075–1087.
- Diard, O. (2001). *Un exemple de couplage, comportement-endommagement-environnement, dans les polycristaux. Application à l'interaction Pastille-Gaine*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Eberl, F., Forest, S., Wroblewski, T., Cailletaud, G., and Lebrun, J. (2002). Finite element calculations of the lattice rotation field of a tensile loaded nickel base alloy multicrystal and comparison to topographical X-ray diffraction measurements. *Met. Mat. Trans.*, 33A :2825–2833.
- Errieau, P. and Rey, C. (2004). Modelling of deformation and rotation bands and of deformation induced grain boundaries in IF steel aggregate during large plane strain compression. *Int. J. Plasticity*, 20 :1763–1788.
- Estrin, Y. and Mecking, H. (1984). A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models. *Acta Metall.*, 32 :57–70.
- Evers, L., Brekelmans, W., and Geers, M. (2004). Scale dependent crystal plasticity framework with dislocation density and grain boundary effects. *Int. J. Solids and Structures*, 41 :5209–5230.
- Evers, L., Parks, D., Brekelmans, W., and Geers, M. (2002). Crystal plasticity model with enhanced hardening by geometrically necessary dislocation accumulation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50 :2403–2424.
- Fahrat, C. and Roux, F. (1994). Implicit parallel processing in structural mechanics. *Comput. Mech. Adv.*, 2.
- Feyel, F. (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., and Roux, F. (1997). Application du calcul parallèle aux modèles à grand nombre de variables internes. *Colloque national en calcul de structures, Giens, France*.

- Fivel, M. and Forest, S. (2004). *Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du polycristal*. Techniques de l'Ingénieur, M4017, 11 pages.
- Fivel, M., Robertson, C., Canova, G., and Boulanger, L. (1998). Three-dimensional modeling of indent-induced plastic zone at a mesoscale. *Acta materialia*, 46 :6183–6194.
- Fleck, N. and Hutchinson, J. (1997). Strain gradient plasticity. *Adv. Appl. Mech.*, 33 :295–361.
- Fleck, N. and Hutchinson, J. (2001). A reformulation of strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49 :2245–2271.
- Fleck, N., Muller, G., Ashby, M., and Hutchinson, J. (1994). Strain gradient plasticity : Theory and experiment. *Acta metall. mater.*, 42 :475–487.
- Forest, S. (2001). Cosserat media. In Buschow, K., Cahn, R., Flemings, M., Ilshner, B., Kramer, E., and Mahajan, S., editors, *Encyclopedia of Materials : Science and Technology*, pages 1715–1718. Elsevier.
- Forest, S., Barbe, F., and Cailletaud, G. (2000). Cosserat modelling of size effect in the mechanical behaviour of polycrystals and multi-phase materials. *Int. J. Solids Structures*, 37 :7105–7126.
- Forest, S., Boubidi, P., and Sievert, R. (2001a). Strain localization patterns at a crack tip in generalized single crystal plasticity. *Scripta Materialia*, 44 :953–958.
- Forest, S., Cailletaud, G., and Sievert, R. (1997). A Cosserat theory for elastoviscoplastic single crystals at finite deformation. *Archives of Mechanics*, 49(4) :705–736.
- Forest, S. and Fivel, M. (2001). Modèles discrets et continus de la plasticité des métaux : du monocristal au polycristal. In *Ecole thématique St Pierre d'Oléron, 2001, Microscopie des défauts cristallins, ouvrage collectif sous la direction de J.P. Morrioli*, pages 457–466. Société Française des Microscopies.
- Forest, S., Pradel, F., and Sab, K. (2001b). Asymptotic analysis of heterogeneous Cosserat media. *International Journal of Solids and Structures*, 38 :4585–4608.
- Forest, S. and Sedláček, R. (2003). Plastic slip distribution in two-phase laminate microstructures : dislocation-based versus generalized-continuum approaches. *Philos. Mag.*, 83 :245–276.
- Forest, S., Sievert, R., and Aifantis, E. (2002). Strain gradient crystal plasticity : Thermomechanical formulations and applications. *Journal of the Mechanical Behavior of Materials*, 13 :219–232.
- François, D., Pineau, A., and Zaoui, A. (1991). *Comportement mécanique des matériaux. Volume 1 : élasticité et élastoplasticité*. Hermès, Paris.
- Gao, H. and Huang, Y. (2003). Geometrically necessary dislocation and size-dependent plasticity. *Scripta Mater.*, 48 :113–118.
- Germain, P. (1973a). La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus, première partie : théorie du second gradient. *J. de Mécanique*, 12 :235–274.
- Germain, P. (1973b). The method of virtual power in continuum mechanics, part 2 : Microstructure. *SIAM, J. Appl. Math.*, 25 :556–575.
- Gilbert, E. (1962). Random subdivisions of space into crystals. *Ann. Math. Stat.*, 33 :958–972.
- Groma, I. and Voros, G. (2003). Origin of gradient terms in plasticity at different length scales. *Scripta Mat.*, 48 :161–165.
- Günther, W. (1958). Zur Statik und Kinematik des Cosseratschen Kontinuums. *Abhandlungen der Braunschweig. Wiss. Ges.*, 10 :195–213.

- Gurtin, M. (2002). A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50 :5–32.
- Haboussi, M., Dumontet, H., and Billoët, J. (2001). On the modelling of interfacial transition behaviour in composite materials. *Computational Materials Science*, 20 :251–266.
- Hansen, N. (2004). Hall-petch relation and boundary strengthening. *Scripta Mater.*, 51 :801–806.
- Harder, J. (1999). A crystallographic model for the study of local deformation processes in polycrystals. *Int. J. Plast.*, 15 :605–624.
- Harren, S. and Asaro, R. (1989). Nonuniform deformations in polycrystals and aspects of the validity of the Taylor model. *J. Mech. Phys. Solids*, 37 :191–232.
- Hashimoto, K. and Margolin, H. (1983). The role of elastic interaction stresses on the onset of slip in polycrystalline alpha brass-I. experimental determination of operating slip systems and qualitative analysis. *Acta Met.*, 31 :773–785.
- Havlicek, F., Kratochvil, J., Tokuda, M., and Lev, V. (1990). Finite element model of plastically deformed multicrystal. *Int. J. of Plasticity*, 6 :281.
- Hill, R. (1965). Continuum micro-mechanisms of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, 13 :89–101.
- Hoc, T. (1999). *Etudes expérimentales et numériques de la localisation de la déformation lors de changements de trajet dans un acier doux*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris.
- Hoc, T., J.Crepin, Gélébart, L., and Zaoui, A. (2003). A procedure for identifying the plastic behavior of single crystals from the local response of polycrystals. *Acta Mat.*, 51 :5477–5488.
- Hoc, T., Rey, C., and Raphanel, J. (2001). Experimental and numerical analysis of localization during sequential test for an IF-Ti steel. *Acta Mater.*, 49 :1835–1846.
- Honeycombe, R. (1984a). *The plastic deformation of metals*. Edward Arnold.
- Honeycombe, R. (1984b). *The plastic deformation of metals*. Edward Arnold.
- Kalidindi, S., Bronkhorst, C., and Anand, L. (1992). Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of fcc metals. *J. Mech. Phys. Solids*, 3 :537–569.
- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., and Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40 :3647–3679.
- Kratochvil, J., Labbé, E., Rey, C., and Yang, S. (1999). On physically motivated mesoscale Cosserat model of shear band formation. *Scripta Materialia*, 41 :761–766.
- Kröner, E. (1963). On the physical reality of torque stresses in continuum mechanics. *Int. J. Engng. Sci.*, 1 :261–278.
- Kröner, E. (1969). Initial studies of a plasticity theory based upon statistical mechanics. In *Inelastic behavior of solids*, Ed. Kanninen M.F., Adler W.F., Rosenfield A.R., Jaffee R.I., pages 137–148. Mc Graw-Hill.
- Labbé, E., Hoc, T., and Rey, C. (1998). A simplified crystallographic approach of bifurcation for single crystals and polycrystals. *Journal de Physique IV*, 8 :Pr8–215–221.
- Lebensohn, R., Castelnau, O., Brenner, R., and Gilormini, P. (2005). Study of the antiplane deformation of linear 2d polycrystals with different microstructures. *Int. J. Solids and Structures*, 42 :5441–5459.

- Lippmann, N., Steinkopff, T., Schmauder, S., and Gumbsch, P. (1997). 3d-finite-element-modelling of microstructures with the method of multiphase elements. *Computational Materials Science*, 9 :28–35.
- Mandel, J. (1971). *Plasticité classique et viscoplasticité*, volume 97 of *CISM Courses and lectures*. Springer Verlag.
- Mandel, J. (1973). Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *Int. J. Solids and Structures*, 9 :725–740.
- Mary, N., Vignal, V., Oltra, R., and Coudreuse, L. (2005). Finite-element and XRD methods for the determination of the residual surface stress field and the elastic-plastic behaviour of duplex steels. *Philos. Mag.*, 85 :1227–1242.
- Masson, R. (1998). *Estimations non linéaires du comportement global de matériaux hétérogènes en formulation affine*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique.
- McClintock, F. (1960). Contribution of interface couples to the energy of a dislocation. *Acta Metall.*, 8 :127.
- McClintock, F., André, P., Schwerdt, K., and Stoeckly, R. (1958). Interface couples in crystals. *Nature*, 4636 :652–653.
- Mecking, H. and Kocks, U. (1981). Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metall.*, 29 :1865–1875.
- Menzel, A. and Steinmann, P. (2000). On the continuum formulation of higher gradient plasticity for single and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 :1777–1796.
- Méric, L., Cailletaud, G., and Gasperini, M. (1994). F.E. calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests. *Acta metall. mater.*, 42 :921–935.
- Méric, L., Poubanne, P., and Cailletaud, G. (1991). Single crystal modeling for structural calculations. I. model presentation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113 :162–170.
- Mika, D. and Dawson, P. (1999). Polycrystal plasticity modelling of intracrystalline boundary textures. *Acta Mater.*, 47 :1355–1369.
- Mindlin, R. and Eshel, N. (1968). On first strain gradient theories in linear elasticity. *Int. J. Solids Structures*, 4 :109–124.
- Miyamoto, H. (1972). Application of finite-element method to fracture mechanics. In *First International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology*, pages 535–566. Berlin. Mar.
- Mohamed, G., Bacroix, B., Ungar, T., Raphanel, J., and Chauveau, T. (1997). Experimental and numerical determination of the intragranular work hardening in a cold rolled multicrystal. *Mat. Sc. Engng.*, A234-236 :940–943.
- Mura, T. (1987). *Micromechanics of defects in solids*. Martinus Nijhoff.
- Mura, T. (1965). Continuous distribution of dislocations and the mathematical theory of plasticity. *Phys. stat. sol.*, 10 :447–453.
- Musienko, A. (2005). *Plasticité cristalline en présence de grandes déformations et d'endommagement*. Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- Niordson, C. and Hutchinson, J. (2003). On lower order strain gradient plasticity theories. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 22 :771–778.
- Nye, J. (1953). Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Met.*, 1 :153–162.

- Panchanadeeswaran, S., Doherty, R., and Becker, R. (1996). Direct observation of orientation change by channel die compression of polycrystalline aluminum-use of a split sample. *Acta Mat.*, 44 :1233–1262.
- Paquin, A. (2001). Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels. *Int. J. Plasticity*, 17 :1267–1302.
- Parisot, R., Forest, S., Gourgues, A.-F., Pineau, A., and Mareuse, D. (2000). Modelling the mechanical behavior of a multicrystalline zinc coating on a hot-dip galvanized steel sheet. *Comp. Mat. Sci.*, 19 :189–204.
- Quilici, S. and Cailletaud, G. (1999). F.e. simulation of macro-, meso- and micro- scales in polycrystalline plasticity. *Comput. Mat. Sci.*, 16 :383–390.
- Rice, J. (1971). Inelastic constitutive relations for solids : An internal variable theory and its application to metal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 19 :433–455.
- Sanchez-Palencia, E. and Zaoui, A. (1987). *Homogenization techniques for composite media*. Lecture Notes in Physics No. 272, Springer, Berlin.
- Sarma, G. and Dawson, P. (1996). Texture predictions using a polycrystal plasticity model incorporating neighbor interactions. *Int. J. Plast.*, 12 :1023–1054.
- Sarma, G., Radhakrishnan, B., and Zacharia, T. (1998). Finite element simulations of cold deformation at the mesoscale. *Comput. Mat. Sci.*, 12 :105–123.
- Shu, J. (1998). Scale-dependent deformation of porous single crystals. *International Journal of Plasticity*, 14 :1085–1107.
- Shu, J. and Fleck, N. (1998). The prediction of a size effect in micro-indentation. *Int. J. Solids Structures*, 35 :1363–1383.
- Shu, J. and Fleck, N. (1999). Strain gradient crystal plasticity : size-dependent deformation of bicrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47 :297–324.
- Shu, J. Y., King, W. E., and Fleck, N. A. (1999). Finite elements for materials with strain gradient effects. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 44 :373–391.
- Smyshlyaev, V. and Fleck, N. (1994). Bounds and estimates for linear composites with strain gradient effects. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 42 :1851–1882.
- Smyshlyaev, V. and Fleck, N. (1996). The role of strain gradients in the grain size effect for polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44 :465–495.
- Sommerfeld, A. (1978). *Mechanik der deformierbaren Medien*. Vorlesungen über Theoretische Physik, Vol. 2, Verlag Harri Deutsch.
- Takahashi, H., Motohashi, H., Tokuda, M., and Abe, T. (1994). Elastic-plastic finite element polycrystal model. *Int. J. Plast.*, 10 :63–80.
- Teodosiu, C., Raphanel, J., and Tabourot, L. (1993). Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals. *Proc. Int. Seminar Mecamat 91*, pages 153–168.
- Thibaux, P., Chastel, Y., and Chaze, A.-M. (2000). Finite element of a two-phase viscoplastic material : calculation of the mechanical behaviour. *Comp. Mat. Sci.*, 18 :118–125.
- Weng, G. (1983). A micromechanical theory of grain-size dependence in metal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 31 :193–203.
- Xun, F., Hu, G., and Huang, Z. (2004). Size-dependence of overall in-plane plasticity for fiber composites. *International Journal of Solids and Structures*, 41 :4713–4730.
- Z-set package (2001). www.nwnumerics.com, www.mat.ensmp.fr.

- Zeghadi, A., Forest, S., Gourgues, A., and Bouaziz, O. (2005a). Cosserat continuum modelling of grain size effects in metal polycrystals. *Zamm, accepted for publication.*
- Zeghadi, A., Forest, S., Gourgues, A., and Bouaziz, O. (2005b). Modélisation continue de l'effet de taille de grain sur le comportement mécanique d'aciers ferritiques. *17ième Congrès Français de Mécanique.*
- ZSeT/ZéBuLoN (1999). *User manual.* EMP/LMR/NWNM/ONERA.