

Manuel de Référence
Fascicule R5.03 : Mécanique non linéaire
Document R5.03.13

Relation de comportement élasto-viscoplastique pour les matériaux polycristallins cubiques à faces centrées

Résumé :

Un modèle polycristallin a été développé au Centre des Matériaux de l'Ecole des Mines de Paris pour décrire le comportement élasto-viscoplastique de matériaux polycristallins cubiques à faces centrées. Il s'agit d'un modèle à grand nombre de variables internes qui permet, grâce à une description simplifiée de la microstructure (texture cristallographique, systèmes de glissement), de décrire de nombreux phénomènes observés sur ces matériaux (exemples : effet Bauschinger, anisotropie de surface de plasticité).

Il est introduit dans le *Code_Aster* sous le nom de `POLY_CFC` au niveau de la commande `DEFI_MATERIAU` ; le comportement est intégré par un schéma explicite de Runge-Kutta d'ordre 2 à pas adaptatif.

Table des matières

1 Introduction	3
2 Formulation du modèle	4
2.1 Comportement à l'échelle des grains	6
2.1.1 Définitions au niveau des systèmes de glissement.....	6
2.1.2 Loi de comportement à l'échelle des grains	6
2.2 Relation de changement d'échelle	7
2.3 Equations du modèle.....	8
3 Mise en œuvre numérique dans le <i>Code_Aster</i>	9
3.1 Calcul de la contrainte macroscopique	9
3.2 Evolution des variables internes et des variables de localisation.....	10
4 Synthèse	10
5 Bibliographie	11
Annexe 1 Introduction de l'information texture.....	12

1 Introduction

De nombreuses recherches ont porté durant les vingt dernières années sur une modélisation phénoménologique du comportement des matériaux. Le modèle proposé est, en revanche, fondé sur une approche polycristalline qui intègre des informations microstructurales et offre des capacités de modélisation étendues par rapport aux approches phénoménologiques. De plus, par comparaison avec les modèles phénoménologiques utilisant un critère de Von Mises, l'approche micromécanique permet d'avoir un critère de plasticité qui peut présenter des parties anguleuses.

L'idée de base des modélisations cristallographiques de la plasticité est la suivante : l'introduction des variables attachées aux mécanismes physiques est bénéfique pour les capacités de modélisation des relations de comportement correspondantes. En effet, si l'aspect physique des mécanismes de déformation est bien représenté dans le modèle, le caractère prédictif des équations constitutives est amélioré, y compris pour des chargements complexes situés hors du domaine d'identification initial du modèle étudié, puisque le comportement mécanique du matériau est associé à sa microstructure.

Le modèle est conçu pour rendre compte du comportement mécanique de matériaux polycristallins de structure cubique à faces centrées.

Le modèle est introduit dans le *Code_Aster* en 3D, déformations planes (`D_PLAN`), contraintes planes (`C_PLAN`) et axisymétrie (`AXIS`) sous le nom de `POLY_CFC` dans `DEFI_MATERIAU`. Il s'agit d'un modèle polycristallin viscoplastique à grand nombre de variables internes, à savoir 1688 par point d'intégration. La prise en compte de la microstructure s'effectue par l'introduction de la texture. La texture comprend les directions d'orientation et la fraction volumique associées à chaque orientation des grains qui composent la micro-structure.

On présente dans cette note les équations constitutives du modèle et son introduction dans le *Code_Aster*.

2 Formulation du modèle

Il s'agit d'un modèle élasto-viscoplastique qui s'inscrit dans le cadre des approches micromécaniques avec prise en compte d'informations microstructurales pour modéliser les mécanismes élémentaires de la déformation inélastique. La démarche générale est de construire une loi de comportement macroscopique à partir d'une description simplifiée de la microstructure. La méthode consiste alors à décrire la microstructure (c'est-à-dire à l'échelle locale, d'identifier les phases et de caractériser leur comportement) et à exprimer les grandeurs globales comme les moyennes des grandeurs locales. Les échelles et les mécanismes élémentaires à considérer sont choisis de la manière suivante [Figure 2-a] :

- un élément de volume élémentaire représentatif du matériau, pour l'échelle d'arrivée à laquelle doit aboutir le processus de modélisation envisagé, qui permet de décrire le comportement à l'échelle macroscopique,
- le grain, pour l'élément de départ du changement d'échelle, pour lequel la relation de comportement développée est associée au mécanisme de déformation retenu dans cette modélisation, c'est-à-dire le glissement cristallographique, sans considération concernant la morphologie et la répartition spatiale des grains du volume élémentaire (le grain est défini par une orientation).

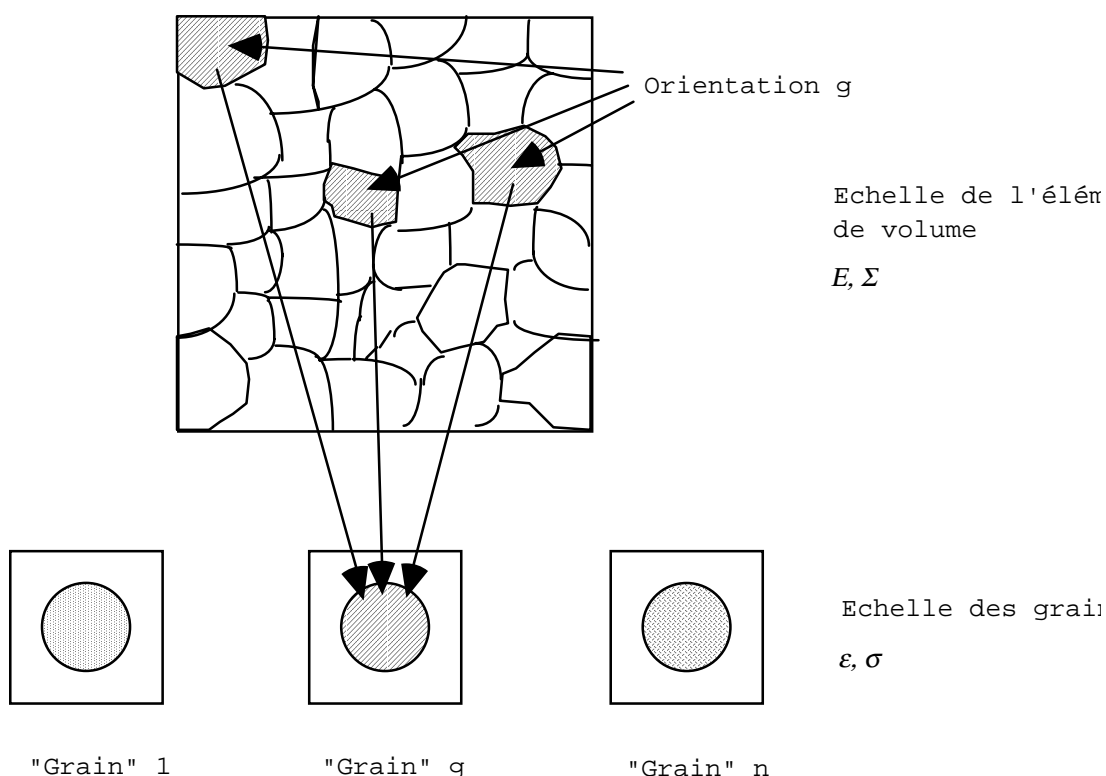


Figure 2-a : Echelles considérées pour la modélisation polycristalline

Le modèle s'appuie sur une approche autocohérente. On y remplace l'analyse détaillée des interactions mécaniques entre les différentes phases par une évaluation approchée qui consiste à envisager successivement les interactions entre chaque phase (les grains ayant même orientation de réseau cristallin sont indiscernables et constituent une phase), l'ensemble de ces phases étant rassemblé en une inclusion, et un milieu homogène fictif, qui constitue la matrice. Le caractère d'autocohérence est assuré par le fait que le comportement mécanique de ce milieu fictif est précisément celui du milieu homogène équivalent au milieu hétérogène étudié. Le modèle a été défini et développé dans les travaux [bib1], [bib2], [bib3] et [bib4].

La modélisation du comportement des phases se fait par l'intermédiaire de variables internes qui vont décrire l'écrouissage du matériau dans les grains, où la plasticité est donnée par la loi de Schmidt au niveau des systèmes de glissement.

Les grandeurs présentes à l'échelle des grains sont la déformation inélastique, la contrainte engendrée dans le grain et un certain nombre de variables internes associées à chaque grain. A l'échelle macroscopique de l'élément de volume, on dispose de la déformation totale, de la déformation inélastique, de la contrainte (les variables internes sont associées aux grains qui constituent l'élément de volume).

La présence de deux échelles de modélisation nécessite par conséquent de définir une étape de changement d'échelle, qui est l'élément essentiel de ce type de modélisation et par lequel les différents modèles polycristallins se distinguent.

Notations :

$\mathbf{E}_{ij}, \mathbf{E}_{ij}^e, \mathbf{E}_{ij}^{th}, \mathbf{E}_{ij}^{vp}$	Déformations totale, élastique, thermique et viscoplastique.
$\varepsilon_{ij}^{vp_g}$	Déformation viscoplastique dans le grain g.
f_g	Fraction volumique de matière constituant le grain g.
$\dot{\gamma}^s,$	Vitesse de glissement du système s.
$\dot{p}^s,$	Intensité de la vitesse de glissement du système s.
$\mathbf{m}_{ij}^s, \mathbf{n}_i, \mathbf{l}_i$	Tenseur d'orientation et vecteurs unitaires correspondant respectivement à la normale au plan qui glisse et à la direction de glissement.
F^s	Fonction seuil.
X^s	Variable d'écrouissage cinématique.
R^s	Variable d'écrouissage isotrope.
τ^s, σ_{ij}^g	Cission résolue sur le système s et contrainte dans le grain g.
α^s, q^{1s}, q^{2s}	Variables associées aux systèmes de glissement s pour la description de l'écrouissage dans les grains. q^{1s} et q^{2s} représentent l'interaction entre les systèmes de glissement (dislocation).
h_{rs}	Composantes de la matrice d'interaction entre les dislocations ($h_{rs} = 1$ sur la diagonale pour prendre en compte un auto-écrouissage lorsque les systèmes sont identiques).
Σ_{ij}	Contrainte macroscopique.
$\mathbf{B}_{ij}, \beta_{ij}^g$	Variables de localisation, grandeurs assimilables à des déformations (à l'échelle macroscopique et à l'échelle des grains).
$J_2(\sigma_{ij})$	$\sqrt{\frac{3}{2} \sum_{ij} (\text{dev} \sigma_{ij}^d)^2}$ ou σ_{ij}^d est la partie déviatorique de σ_{ij} .

2.1 Comportement à l'échelle des grains

2.1.1 Définitions au niveau des systèmes de glissement

Le mécanisme de déformation considéré est le glissement cristallographique. Il convient donc de définir le comportement mécanique lié à ce mécanisme où l'on suppose qu'un système de glissement s est actif lorsque sa cisssion résolue τ^s atteint une valeur critique. Pour un matériau cubique à faces centrées, il existe 12 systèmes de glissement qui sont définis par leur tenseur d'orientation m^s à partir des définitions cristallographiques de la direction de glissement (définie par le vecteur unitaire l) et de la normale au plan qui glisse (définie par le vecteur unitaire n).

$$\tau^s = \sigma_{ij}^g : m_{ij}^s \quad m_{ij}^s = \frac{1}{2}(n_i \otimes l_j + l_j \otimes n_i)$$

La vitesse de déformation viscoplastique $\dot{\epsilon}^{vp_g}$ est définie à partir de la connaissance des vitesses de glissement $\dot{\gamma}^s$ pour tous les systèmes de glissement :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp_g} = \sum_{s \in g} m_{ij}^s \dot{\gamma}^s$$

2.1.2 Loi de comportement à l'échelle des grains

Les variables internes du comportement local notées α^s , γ^s et p^s permettent de définir l'évolution de l'écrouissage et de calculer la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}^{vp_g}$ dans tous les grains. α^s est associée à l'écrouissage cinématique et p^s est le glissement viscoplastique cumulé.

La formulation viscoplastique retenue dans cette modélisation propose une fonction puissance (par analogie avec la loi de Norton en fluage) pour définir l'intensité \dot{p}^s de la vitesse de glissement et permet d'avoir accès aux dérivées des variables internes à partir de la connaissance de la contrainte σ^g et des valeurs de variables internes :

$$\dot{p}^s = |\dot{\gamma}^s| = \left\langle \frac{F^s}{k} \right\rangle^n \quad \text{avec } \langle x \rangle = 0 \text{ si } x < 0 \text{ et } \langle x \rangle = x \text{ si } x > 0$$

où k et n sont des paramètres caractéristiques du matériau et de la température.

F^s dépend du seuil initial τ_0 d'écoulement sur le système de glissement s de la cisssion résolue τ^s et de deux variables d'écrouissage X^s et R^s . La variable d'écrouissage cinématique X^s permet de tenir compte des hétérogénéités locales dans les grains dues au développement des dislocations. La variable d'écrouissage isotrope R^s qui rend compte de l'interaction entre les dislocations (par l'intermédiaire d'une matrice d'interaction de composantes h_{rs}) peut présenter une valeur de saturation de l'écrouissage.

Le critère d'écoulement correspondant à des équipotentielles en viscoplasticité s'écrit :

$$F^s = |\tau^s - X^s| - \tau_0 - R^s + \frac{1}{2} c/d (x^s)^2$$

où τ_0 , c et d sont des paramètres caractéristiques du matériau et de la température.

Les équations d'état des variables sont les suivantes :

$$X^s = c \alpha^s + a \gamma^s = x^s + a \gamma^s$$

$$R^s = Q_1 \left(\sum_{r \in S} h_{rs} q^{1s} \right) + Q_2 q^{2s}$$

$$h_{rs} = \delta_{rs} + h(1 - \delta_{rs}) \text{ avec } \delta_{rs} = 0 \text{ si } r \neq s \text{ et } \delta_{rs} = 1 \text{ si } r = s$$

où c , a , Q_1 , Q_2 et h sont des paramètres caractéristiques du matériau et de la température.

Il reste à définir les lois d'évolution des variables d'écrouissage :

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d \alpha^s \dot{p}^s$$

$$\dot{q}^{is} = b_i (1 - q^{is}) \dot{p}^s \quad (i = 1, 2)$$

où d , b_1 et b_2 sont des paramètres caractéristiques du matériau et de la température.

2.2 Relation de changement d'échelle

Il s'agit de modéliser les contraintes internes et les hétérogénéités de déformation d'une phase à une autre pour avoir accès aux grandeurs globales. On note que la déformation totale dans chaque grain n'est jamais calculée. On s'intéresse à la déformation viscoplastique des phases, qui permet de définir la déformation viscoplastique du volume élémentaire représentatif du matériau à partir de la pondération des fractions volumique des phases f_g :

$$\mathbf{E}_{ij}^{vp} = \sum_g f_g \mathbf{\epsilon}_{ij}^{vp_g}$$

Deux relations de localisation sont programmées (suivant la présence ou non des coefficients D et δ dans [éq 2.2-2]). La difficulté pour justifier, sur des données macroscopiques de comportement, la pertinence de la règle de changement d'échelle est évitée en disposant d'une relation [bib5] qui peut servir de référence car elle valide le caractère d'autocohérence. Cette validation est effective sous certaines conditions, à savoir : isotropie du matériau, comportement élastique homogène et chargement monotone :

$$\sigma_{ij}^g = \Sigma_{ij} + \alpha \mu \left(\mathbf{E}_{ij}^{vp} - \mathbf{\epsilon}_{ij}^{vp_g} \right) \quad \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2} \mu \frac{\|E_{ij}^{vp}\|}{J_2(\Sigma_{ij})} \quad \text{éq 2.2-1}$$

La deuxième relation, développée plus particulièrement pour des chargements cycliques [bib6] permet de donner une bonne description pour schématiser les interactions entre les grains :

$$\sigma_{ij}^g = \Sigma_{ij} + \mu(\mathbf{B}_{ij} - \beta_{ij}^g) \quad \mathbf{B}_{ij} = \sum_g f_g \beta_{ij}^g \quad \text{éq 2.2-2}$$

$$\dot{\beta}_{ij}^g = \dot{\epsilon}_{ij}^{vp_g} - D(\beta_{ij}^g - \delta \epsilon_{ij}^{vp_g}) \|\dot{\epsilon}_{ij}^{vp_g}\|$$

où D et δ sont des paramètres caractéristiques du matériau et de la température.

2.3 Equations du modèle

Comportement global :

$$\mathbf{E}_{ij} = \mathbf{E}_{ij}^e + \mathbf{E}_{ij}^{th} + \mathbf{E}_{ij}^{vp} \quad \mathbf{E}_{ij}^{vp} = \sum_g f_g \epsilon_{ij}^{vp_g}$$

Comportement intragranulaire :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{vp_g} = \sum_{s \in g} m_{ij}^s \dot{\gamma}^s \quad m_{ij}^s = \frac{1}{2} (n_i \otimes l_j + l_j \otimes n_i)$$

$$\dot{p}^s = |\dot{\gamma}^s| = \left\langle \frac{F^s}{k} \right\rangle^n \quad \text{avec } \langle x \rangle = 0 \text{ si } x < 0 \text{ et } \langle x \rangle = x \text{ si } x > 0$$

Critère :

$$F^s = |\tau^s - X^s| - \tau_0 - R^s + \frac{1}{2} c/d (X^s)^2$$

$$\tau^s = \sigma_{ij}^g : m_{ij}^s$$

$$X^s = c \alpha^s + a \gamma^s = x^s + a \gamma^s$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d \alpha^s \dot{p}^s$$

$$R^s = Q_1 \left(\sum_{r \in s} h_{rs} q^{1s} \right) + Q_2 q^{2s}$$

$$\dot{q}^{is} = b_i (1 - q^{is}) \dot{p}^s \quad (i = 1, 2)$$

$$h_{rs} = h(1 - \delta_{rs}) + \delta_{rs} \quad \text{avec } \delta_{rs} = 1 \text{ si } r = s \text{ et } \delta_{rs} = 0 \text{ si } r \neq s$$

Relations de changement d'échelle (accessible suivant la présence des paramètres D et δ) :

$$\sigma_{ij}^g = \Sigma_{ij} + \alpha \mu (E_{ij}^{vp} - \varepsilon_{ij}^{vp_g}) \quad (D \text{ et } \delta \text{ sont absents du fichier de commande [bib5]})$$

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2} \mu \frac{\|E_{ij}^{vp}\|}{J_2(\Sigma_{ij})}$$

$$\sigma_{ij}^g = \Sigma_{ij} + \mu(B_{ij} - \beta_{ij}^g) \quad (D \text{ et } \delta \text{ sont définis [bib6]})$$

$$B_{ij} = \sum_g f_g \beta_{ij}^g \quad \dot{\beta}_{ij}^g = \dot{\varepsilon}_{ij}^{vp_g} - D(\beta_{ij}^g - \delta \varepsilon_{ij}^{vp_g}) \|\dot{\varepsilon}_{ij}^{vp_g}\|$$

Dans le Code_Aster, l'ensemble des paramètres du modèle
 $D, \delta, n, k, Q_1, b_1, h, Q_2, b_2, c, d, a$ peut être fonction de la température.

3 Mise en œuvre numérique dans le Code_Aster

Le schéma général adopté avec le comportement polycristallin pour intégrer la relation de comportement est une méthode de Runge Kutta à pas adaptatif [bib7]. Le schéma programmé est d'ordre 2.

A partir de l'état de déformation $E(t)$, de la connaissance des variables internes $y(t) = (\alpha^s, \gamma^s, p^s)$ et des variables de localisation $\beta^g(t)$ à l'instant t , on cherche à trouver, à l'instant $t+\Delta t$ la contrainte macroscopique Σ pour traduire l'équilibre. A partir de l'incrément de déformation totale proposé à l'étape globale $\Delta E = E(t + \Delta t) - E(t)$ et d'une hypothèse d'évolution de cette déformation linéaire en temps, on intègre explicitement les équations différentielles du comportement en contrôlant la précision par une méthode à pas variable.

On connaît donc $E^{vp}(t + \Delta t)$, ce qui permet de calculer $\Sigma(t + \Delta t)$ comme précisé ci-dessous.

3.1 Calcul de la contrainte macroscopique

On calcule la contrainte Σ à partir de la déformation viscoplastique E^{vp} . Celle-ci correspond à la première grandeur rangée dans le vecteur qui constitue l'ensemble des variables du modèle y .

$$\Sigma_{ij} = C(E_{ij} - E_{ij}^{th} - E_{ij}^{vp})$$

3.2 Evolution des variables internes et des variables de localisation

Connaissant la cission τ^s (calculée à partir de la contrainte σ^g et des tenseurs d'orientation pour tous les systèmes de glissement) et les variables internes γ dans les grains, on peut calculer les dérivées des variables $\dot{\gamma}$ à partir de l'écriture explicite des équations du modèle et avoir accès aux vitesses de déformation viscoplastique dans les grains $\dot{\varepsilon}^{vp_g}$.

Les variables caractéristiques de la relation de localisation utilisées pour décrire un comportement sous sollicitations cycliques sont accessibles pour tous les grains à partir des informations de déformation et de vitesse [éq 2.2-1].

4 Synthèse

Le modèle est accessible dans le *Code_Aster* en 3D, déformations planes (D_PLAN), contraintes planes (C_PLAN) et axisymétrie (AXIS) à partir du mot-clé COMP_INCR de la commande STAT_NON_LINE. L'ensemble des paramètres du modèle est fourni sous le mot-clé facteur POLY_CFC ou POLY_CFC_FO de la commande DEFI_MATERIAU [U4.23.01].

```
/  POLY_CFC : (  DL      :  D
                  DA      :   $\delta$ 
                  N       :  n
                  K       :  kMPa
                  TAU_0   :   $\tau_0$  MPa
                  Q1      :   $Q_1$  MPa
                  B1      :   $b_1$ 
                  HL      :  h
                  Q2      :   $Q_2$  MPa
                  B2      :   $b_2$ 
                  C1      :  c MPa
                  D1      :   $d$  (MPa)3
                  C2      :  a MPa )
```

Les paramètres D et δ sont facultatifs. Lorsqu'ils sont présents, la règle de changement d'échelle utilisée [bib6] est celle de l'équation [éq 2.2-2]. Sinon, on utilise la règle [bib5] de l'équation [éq 2.2-1] (valable uniquement sous chargement monotone) ; cf. [§2.2].

La sélection du schéma d'intégration de la relation de comportement se fait par l'option RUNGE_KUTTA_2 de l'opérande RESO_INTE à partir du mot-clé NEWTON de la commande STAT_NON_LINE.

La méthode ne fournit pas de matrice tangente ; on utilise donc la matrice élastique pour l'équilibre global ce qui implique que l'utilisateur doit se contraindre à définir un découpage du pas de temps relativement fin, pour que l'équilibre au niveau global soit facilité.

Le nombre important de variables internes utilisées dans cette modélisation implique de ne les stocker qu'au dernier instant de calcul pour permettre les reprises. On utilise alors l'option CHAM_EXCLU du mot-clé facteur ARCHIVAGE de la commande STAT_NON_LINE avec le seul argument possible 'VARI'. Les variables internes ne sont alors sauvegardées qu'au dernier pas de temps.

5 Bibliographie

- [1] CAILLETAUD G. : "Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux", Thèse de Doctorat d'Etat de l'Université Paris 6, 1987.
- [2] PILVIN P. : "Approches multiéchelles pour la prévision du comportement anélastique des métaux", Thèse de Doctorat d'Etat de l'Université Paris 6, 1990.
- [3] CAILLETAUD G. : "A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals", Int. J. of Plasticity, 8, pp. 55-73, 1992.
- [4] PILVIN P. : "The contribution of micromechanical approaches to the modelling of inelastic behaviour of polycrystals", Int. Conf. on Biaxial / Multiaxial fatigue, France, ESIS/SF2M, pp. 31-46, 1994.
- [5] BERVEILLER M., ZAOUI A. : "An extension of the self-consistent scheme to plasticity flowing polycrystal" J. Mech. Phys. Solids, 6, pp. 325-344, 1979.
- [6] PILVIN P. : "Contribution de la simulation numérique au développement de relations de comportement en Mécanique des Matériaux", Mémoire d'habilitation à diriger des recherches de l'Université Paris 6, 1995.
- [7] CROUZEIX M., MIGNOT A.L. : "Analyse numérique des équations différentielles", Masson, 1989.

Annexe 1 Introduction de l'information texture

La texture du matériau intervient dans ce modèle comme une donnée de description fournie une fois pour toutes dans `DEFI_MATERIAU`, au même titre que les paramètres matériau. Celle-ci permet de calculer les tenseurs d'orientation \mathbf{m}^s en effectuant un changement de repère entre le repère du matériau (repère du laboratoire) et le repère cristallographique (le repère local) et également d'avoir accès aux fractions volumiques f_g de matériau qui présentent telle ou telle orientation cristallographique.

Cette texture est ainsi définie de la manière suivante :

$\varphi_1, \phi, \varphi_2, f_g$ où $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ sont les angles d'Euler.

On dispose par défaut, d'une description de texture répartie de manière isotrope sur 40 orientations différentes pour $f_g = 1/40$.

On peut également introduire les résultats de texture obtenus à partir d'une étude expérimentale (diffraction de rayons X des plans cristallographiques de la structure cubique à faces centrées). On les présente alors sous la forme d'une succession de 3 angles (angles d'Euler qui correspondent à la mise en coïncidence du repère lié à l'échantillon et de celui lié au cristal) associés à une fraction volumique. Si l'on retient 40 orientations pour cette modélisation, le fichier de texture comporte alors 40 lignes correspondant aux 40 orientations les plus représentées dans l'échantillon de matière analysé.

Pour la modélisation introduite dans le *Code_Aster*, on ne tient pas compte de l'éventuelle évolution de texture avec l'écrouissage (hypothèses des petites perturbations), ce qui permet de considérer comme paramètres fixes les fractions volumiques f_g et les composantes des tenseurs \mathbf{m}^s (6 composantes), définis pour chaque grain (chaque orientation) et pour les 12 systèmes de glissement principaux de la structure CFC ($40 \times 12 \times 6 = 2880$ composantes).