



HAL
open science

Étude de l'intégration d'un modèle polycristallin dans un code d'éléments finis en élastoplasticité

Patrick Zattarin

► **To cite this version:**

Patrick Zattarin. Étude de l'intégration d'un modèle polycristallin dans un code d'éléments finis en élastoplasticité. Autre. Université Paul Verlaine - Metz, 2000. Français. NNT : 2000METZ046S . tel-01748950

HAL Id: tel-01748950

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01748950>

Submitted on 29 Mar 2018

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

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



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



**INSTITUT SUPERIEUR DE GENIE MECANIQUE
ET PRODUCTIQUE**

THESE

Présentée à



UNIVERSITE DE METZ
PAR

Patrick ZATTARIN

**Pour l'obtention du grade de :
DOCTEUR de L'UNIVERSITE de METZ**

**SPECIALITE : SCIENCES DE L'INGENIEUR
OPTION : MECANIQUE ET MATERIAUX**

**ETUDE DE L'INTEGRATION D'UN MODELE
POLYCRISTALLIN DANS UN CODE D'ELEMENTS
FINIS EN ELASTOPLASTICITE**

Soutenue le 27 janvier 2000 à 14h30 (Salle des assemblées) devant le jury composé de :

Pawel LIPINSKI	Université de Metz	<i>directeur de thèse</i>
Said AHZI	ULP de strasbourg	<i>rapporteur</i>
Krzysztof WIERZBANOWSKI	Faculté de physique, Cracovie	<i>rapporteur</i>
Marcel BERVEILLER	ENSAM de Metz	<i>examineur</i>
Laszlo TOTH	Université de Metz	<i>examineur</i>
Gilles DUCHANOIS	ENSTIB, Epinal	<i>examineur</i>
Eric SCACCIATELLA	SOLSI, Woippy	<i>examineur</i>

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	2000 1405
Cote	S/M3 00/46
Loc	Magasin

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux de l'Institut Supérieur de Génie Mécanique et Productique de l'Université de Metz au sein de l'équipe du Pr. P. Lipinski

Je tiens tout d'abord à exprimer ma reconnaissance au professeur P. Lipinski, mon directeur de thèse, pour m'avoir témoigné sa confiance en m'accueillant au sein de son équipe et m'avoir donné ainsi l'occasion de vivre une expérience enrichissante.

Je remercie K. Wierzbanski, professeur à la faculté de physique de Cracovie, et S. Ahzi, professeur à l'université Louis Pasteur de Strasbourg, qui ont bien voulu se charger de la lourde tâche de rapporter ce travail.

Je remercie également Messieurs M. Berveiller, G. Duchanois, E. Scacciatella, L. Toth, pour avoir accepté de participer au jury de thèse.

Je remercie vivement tous les membres du laboratoire pour l'ambiance agréable dans laquelle se sont déroulées ces recherches. Merci à tous les thésards passés et présents pour leur bonne humeur : Fred, Den's, Xav, Isa, Anne, Raph, Aimé, Koffi, Yaz, Laurent, Amadou, Idriss.

Je n'oublie pas ma famille ainsi que mes amis pour le soutien moral qu'ils m'ont apporté durant toutes mes études.

Sommaire

CHAPITRE I : Introduction	1
<i>Références bibliographiques</i>	7
CHAPITRE II : Introduction à la plasticité phénoménologique	9
II.1 - Introduction	11
II.2 – Bases théoriques de la plasticité phénoménologique	12
II.2.1 – Introduction	12
II.2.2 – Critères de plasticité	14
<u>Critère de Tresca</u>	14
<u>Critère de Von Mises</u>	14
<u>Critères de plasticité pour les matériaux anisotropes</u>	15
II.2.3 – Loi d'écoulement plastique	16
II.3 – Relations élastoplastiques contraintes – déformations	19
II.3.1 – Ecrouissage isotrope	19
II.3.2 – Ecrouissage cinématique	22
II.3.3 – Ecrouissage mixte	25
II.3.4 – Autres modèles d'écrouissage	27
II.4 – Conclusions	27
<i>Références bibliographiques</i>	29
CHAPITRE III : Plasticité du polycristal	31
III.1 – Introduction	33
III.2 – Loi de comportement du monocristal	36

III.2.1 – Introduction	36
III.2.2 – Mécanisme des dislocations	37
III.2.3 – Comportement phénoménologique du monocristal	38
III.2.4 – Loi élastoplastique du monocristal	40
III.3 – Homogénéisation	43
III.3.1 – Introduction	43
III.3.2 – Transition d'échelle	44
III.3.3 – Homogénéisation	44
III.4 – Equation intégrale cinématique	45
III.5 – Approximation autocohérente	49
III.5.1 – Hypothèses	49
III.5.2 – Approximation autocohérente	51
III.6 – Evolution de la microstructure	52
III.7 – Conclusions	54
<i>Références bibliographiques</i>	55

CHAPITRE IV : Lois de comportement, schémas de résolution numérique et applications **57**

IV.1 – Détermination des tenseurs d'interaction	59
IV.1.1 – Introduction	59
IV.1.2 – Expression analytique des tenseurs d'interaction	59
IV.1.3 – Approximation numérique des tenseurs d'interaction	61
IV.1.4 – Résultats	62
IV.1.5 – Conclusions	65
IV.2 – Détermination des modules tangents macroscopiques	66
IV.2.1 – Détermination des constantes élastiques globales	66
IV.2.2 – Détermination des modules tangents élastoplastiques macroscopiques	74
IV.3 – Recherche des systèmes actifs	76
IV.4 – Loi de comportement élastoplastique	77

IV.5 – Applications	79
IV.5.1 – Validation du modèle proposé	79
IV.5.2 – Evolution de la surface de plasticité	86
IV.5.3 – Comparaison avec des données expérimentales	94
IV.6 – Conclusions	97
<i>Références bibliographiques</i>	<i>99</i>
CHAPITRE V : Intégration du modèle autocohérent dans un code de calcul de structures	101
V.1 – Introduction	103
V.2 – Démarche générale des éléments finis	104
V.2.1 – Introduction	104
V.2.2 – Principe des puissances virtuelles	105
V.2.3 – Discrétisation par la méthode des éléments finis	106
V.3 – Implantation du modèle autocohérent dans la méthode des éléments finis	109
V.3.1 – Introduction	109
V.3.2 – Couplage complet, essai de traction monotone	114
V.3.3 – Couplage mixte, éprouvette oligocyclique	121
V.3.4 – Couplage adaptatif, tube sous pression	134
V.4 – Conclusions	143
<i>Références bibliographiques</i>	<i>145</i>
Conclusion générale	147
Annexe : Détermination des tenseurs d'interaction	153
<i>Références bibliographiques</i>	<i>159</i>

CHAPITRE I

INTRODUCTION

La modélisation théorique du comportement thermomécanique des matériaux permet d'éviter l'emploi systématique de campagnes d'essais expérimentaux destinées à l'amélioration ou la création d'un produit, qui deviennent alors complémentaires aux modèles. L'utilisation de matériaux nouveaux (aciers TRIP, composites, céramiques) renforce ce besoin de disposer d'une modélisation précise, maintenant indispensable dans de nombreux domaines. L'étude de la tenue en fatigue d'une structure (pont, plate-forme) en est un exemple, de même que la prévision de la déformation d'une pièce lors de sa réalisation par certains procédés de fabrication comme le laminage, l'estampage, etc. L'évolution des outils informatiques a permis l'émergence de codes de calculs numériques capables de simuler le comportement d'une structure soumise à un chargement thermomécanique. Dans ce domaine, la méthode des éléments finis est à même d'évaluer avec précision sa réponse élastoplastique. Pour cela, il est nécessaire de considérer les lois théoriques du comportement du matériau constitutif de la structure à étudier. Actuellement, la plupart des codes d'éléments finis utilisent des lois relativement faciles à mettre en place, mais elles ne peuvent restituer une réponse élastoplastique fiable que pour des cas de chargements simples. En effet ces lois étant essentiellement phénoménologiques, elles ne prennent pas en compte le caractère microstructural du matériau et ne peuvent ainsi déterminer correctement son état interne, qui trouve toute son importance lors de chargements complexes.

Notre travail consiste à développer un code d'éléments finis en y implantant une modélisation du comportement élastoplastique des matériaux basée sur une approche cristallographique. Cette étude, qui fait suite aux travaux de Scacciatella (1994), est menée dans le cadre des petites déformations appliquées aux métaux. L'importance est donnée ici au modèle théorique introduit dans le code, où son aptitude à déterminer le comportement élastoplastique des métaux a une influence notable sur la précision des résultats.

C'est au début du XX^e siècle que les premières expériences systématiques ont été menées afin d'analyser le comportement mécanique des métaux. Ces études, réalisées par Guest (1900), ont permis de déterminer une contrainte seuil à partir de laquelle la déformation n'est plus uniquement élastique, mais devient élastoplastique. Lors de la déformation plastique le matériau s'écroute, la contrainte limite d'écoulement plastique augmente dans la direction du chargement et diminue dans le sens opposé. Cette anisotropie des propriétés mécaniques, appelée effet Bauschinger, est particulièrement importante pour les métaux déformés à froid. L'ampleur du phénomène dépend de la nature du matériau (composition chimique, structure cristallographique), de la prédéformation plastique, ainsi que de la désorientation entre les deux directions de chargement, voir par exemple Woillez & al. (1977). D'une façon plus générale, le seuil de plasticité peut être représenté dans

l'espace des contraintes par une surface de plasticité. Lors de la déformation plastique cette surface évolue, non seulement sa taille change mais aussi sa forme. Par cela, on constate que l'érouissage des métaux est un phénomène très complexe et la principale difficulté rencontrée par les modèles théoriques est de caractériser cette surface après une prédéformation plastique. Les modèles théoriques, permettant de décrire le comportement élastoplastique des métaux, sont généralement classés selon deux types d'approches.

L'approche phénoménologique est de beaucoup la plus utilisée par la plupart des codes d'éléments finis. Elle a l'avantage d'être relativement simple à mettre en place et la surface de plasticité y est définie par une fonction convexe, en terme de contraintes et de taux d'érouissage. Fondées principalement sur des données expérimentales, les lois de comportement du matériau qui la caractérise sont construites à partir d'observations macroscopiques. Le chapitre II est consacré à une présentation succincte des différents modèles implantés dans la majorité des codes d'éléments finis. Cette approche permet une bonne évaluation du comportement élastoplastique d'un matériau lors d'un chargement monotone, mais ne peut décrire précisément l'évolution de la surface de plasticité. En effet les critères utilisés ne prennent pas en compte les paramètres microstructuraux qui affectent significativement la forme de la surface de plasticité, on peut citer en particulier les contraintes internes et les textures cristallographiques. Dans ces conditions, les modèles phénoménologiques sont inadaptés à l'étude d'un matériau soumis à un chargement complexe, ce qui limite leur domaine d'utilisation.

Une alternative à l'approche phénoménologique est l'approche cristallographique. Celle-ci permet de prendre en compte les phénomènes microstructuraux qui influencent l'écoulement plastique des matériaux. Les modèles issus de cette approche ont donc une plus grande aptitude à déterminer la forme et l'évolution de la surface de plasticité. Pour un matériau polycristallin, ces modèles sont déterminés à partir du comportement élastoplastique de chaque grain de l'agrégat. En contre partie, l'approche cristallographique est plus lourde et requiert un traitement d'une masse importante de données, ce qui rend obligatoire l'utilisation de puissants outils informatiques. Dans le chapitre III, on présente les bases de la plasticité cristalline. On introduit la théorie de glissements des plans cristallographiques engendrés par le mouvement des dislocations. Avec une telle démarche, il est nécessaire de préciser l'échelle de la modélisation. Dans ce travail, on se place à l'échelle du grain, pour laquelle on peut définir les lois qui caractérisent le glissement des plans cristallographiques du monocristal. Le durcissement engendré par le mécanisme des dislocations est pris en compte par l'intermédiaire d'une matrice d'érouissage. A partir des grandeurs microscopiques, localisées au niveau des grains, on peut, par homogénéisation, déterminer les grandeurs macroscopiques du Volume Élémentaire Représentatif. C'est sur ce volume, noté V.E.R., que l'on met en place le

modèle de plasticité cristalline. Pour cela, le volume élémentaire doit avoir une dimension relativement grande par rapport à la taille des hétérogénéités (grains, inclusions). Cela permet de le considéré représentatif du matériau, ou statiquement équivalent d'une zone à l'autre du matériau considéré comme macroscopiquement homogène. En plus de cette condition de microhétérogénéité et de macrohomogénéité, la taille de ce volume doit rester suffisamment petite par rapport aux dimensions de la pièce constituée du matériau étudié, pour que l'analyse de structure correspondante puisse se mener avec les moyens habituels du calcul différentiel ou intégral. Cette méthode à transition d'échelle conduit à la mise en place d'une équation intégrale. Dans cette étude, on propose une résolution de cette équation en utilisant une approche autocohérente développée par Lipinski & Berveiller (1989) et basée sur la solution du problème d'inclusion d'Eshelby (1957).

Lors de la résolution de l'équation intégrale on introduit le tenseur T^{II} qui caractérise l'interaction entre une inclusion (un grain du polycristal) et son milieu extérieur supposé homogène, ainsi que le tenseur T^{II} représentant l'interaction entre les inclusions dans le cadre d'une modélisation à sites multiples. L'expression de ces tenseurs est définie sous forme d'intégrale double dont la solution analytique existe uniquement pour des inclusions sphériques plongées dans un milieu isotrope. Dans tout autre cas, nous proposons dans le chapitre IV un nouvel algorithme d'évaluation numérique de ces tenseurs d'interaction. On montre alors que cet algorithme permet d'obtenir, par rapport à une méthode de quadrature de Gauss, une plus grande précision des résultats en un temps moindre.

Une première application de l'approche autocohérente proposée est réalisée dans le cadre de l'élasticité linéaire, pour laquelle on met en place un modèle à sites multiples. Cette approche permet de rendre compte de l'anisotropie induite par l'arrangement topologique des inclusions à l'intérieur d'un composite. On valide alors le modèle en comparant les résultats avec ceux issus d'autres études, notamment, Begis *et al.* (1983), Sangani & Lu (1987), Brockenbrough *et al.* (1992), Rodin (1993).

Dans la seconde partie, on met en place un modèle élastoplastique basé sur l'approche autocohérente initiée par Hill (1965) et développée par Lipinski & Berveiller (1989). Pour ce modèle, élaboré à partir des travaux de Lipinski (1993), nous proposons un nouveau critère de choix des systèmes de glissements qui sont amenés à s'activer lors de la déformation plastique. Ce critère issu de Leffers (1968) et Wierzbanski *et al.* (1992) permet non seulement d'améliorer la précision des calculs, mais aussi leur vitesse d'exécution. On valide alors le modèle proposé par des comparaisons de résultats obtenus par le calcul avec ceux issus d'essais expérimentaux.

En ouvrant une voie considérable à la simulation numérique, l'évolution des moyens informatiques permet non seulement aux modèles cristallographiques de se développer, mais offre désormais la possibilité de les associer à des codes d'éléments finis. Les premières simulations ont été réalisées sur des éprouvettes monocristallines, voir par exemple Asaro (1983), mais de nos jours, on trouve dans

la littérature des résultats de modélisations utilisant le modèle de Taylor (1938), comme Mathur & Dawson (1990) ou Kalindiski et *al.* (1992), et même des modèles plus évolués tel que Cailletaud & Pilvin (1994).

Dans le chapitre V, on présente le couplage du modèle proposé à un code d'éléments finis que nous avons développé. Ce code, établi par Duchanois et *al.* (1992), est fondé sur les travaux de Owen & Hinton (1980). Il propose, dans sa version d'origine, le choix de divers critères d'écoulement à écrouissage isotrope (Tresca, Von Mises, ...) où différentes courbes d'écrouissage peuvent être utilisées, et permet d'étudier le comportement élastoplastique de structures pour des problèmes 2D. Nous généralisons ce code à des géométries 3D, puis nous effectuons le couplage au modèle élastoplastique proposé. Trois couplages ont été développés, et sont utilisés pour l'étude de différents problèmes. Dans le premier couplage, tous les éléments du maillage, discrétisant la structure, sont couplés avec la méthode autocohérente. Le deuxième couplage est mixte. L'utilisateur doit définir pour chaque élément, le type d'approche à laquelle celui-ci sera couplé. Cette approche peut être autocohérente ou phénoménologique (en élasticité uniquement). Pour le dernier couplage, l'attribution de la loi de comportement associée à chacun des éléments est réalisée automatiquement par le code, à partir d'un critère de plasticité. Ces couplages sont validés par des exemples, au travers desquels, on met en évidence leur domaine d'application respectifs.

Références bibliographiques

- Asaro, R., J., (1983), *J. Appl. Mech.*, 50, pp. 921-934.
- Begis, D., Bestagno, A., Duvaut, G., Hassim, A., Nuc, M., (1983), rapport de recherche INRIA.
- Brockenbrough, J., R., Wienecke, H., A., Romanko, A., D., (1992), A unit cell model of a particulate composite.
- Cailletaud, G., Pilvin, P., (1994), *Revue Européenne des éléments finis*, Vol. 3 , 4, pp. 515-541.
- Duchanois, G., Lipinski, P., Dess, J., Caesemaecker, F., (1992), Calcul des contraintes résiduelles dans un appareil à paroi épaisse après traitement thermique local et épreuve hydraulique. AFIAP, Paris.
- Eshelby, J., D., (1957), *Proc. Roy. Soc.*, A 241, p. 376.
- Guest, J., J., (1900), *Philo. Mag.*, 50, pp. 69-132.
- Hill, R., J., (1965), *Mech. Phys. Solids* 13, pp. 89-101
- Kalindiski, S., R., Bronkhorst, C., A., Anand, L., (1992), *J. Mech. Phys. Solids*, 40, pp. 537-569.
- Leffers, T., (1968), *Phys. Stat. Sol.*, 25, p. 337.
- Lipinski, P., (1993), Thèse d'habilitation, Université de Metz.
- Lipinski, P., Berveiller, M., (1989), *Int. J. Plasticity*, 5, pp. 149-172.
- Mathur , K., Dawson, P., (1990), *J. of Engng Mater. Technol.*, 112, pp. 292-297.
- Owen, D., R., J., Hinton, E., (1980). *Finite Elements in Plasticity*, Departement of Civil Engineering University College of Swansa, UK.
- Rodin, G., J., (1993), *Int. J. Solids Structures*, pp. 1849-1863.
- Sangani, A., S., Lu, W., (1987), *J. Mech. Phys. Solids*, 35, pp. 1-21.
- Scacciatella, E., (1994), Thèse de 3^{ème} cycle, Université de Metz.
- Taylor, G., I., (1938), *J. Inst. Metals*, 62, pp. 307-324.
- Wierzbanski, K., Jura, J., Haije, W., G., Helmholtz, R., B., (1992), *Cryst. Res. Technol.*, 27, p. 513.
- Woillez, T., Gingembre, B., Driver, J., Rieu, J., (1977), *Mémoires Scientifiques Revue Métallurgie*, pp. 583-591.

CHAPITRE II

INTRODUCTION

A LA PLASTICITE

PHENOMENOLOGIQUE

Dans ce chapitre on introduit la théorie de la plasticité phénoménologique. Depuis le premier modèle mathématique proposé par Levy et Saint-Venant (1870), d'énormes progrès ont été réalisés dans ce domaine. On présente ici les points importants de la théorie ainsi que les lois phénoménologiques les plus fréquemment utilisées par les codes d'éléments finis, dans le cadre des petites déformations des métaux. Ce chapitre a pour objet uniquement d'évaluer les capacités et les limites de ce genre de modélisations, en portant l'attention sur les hypothèses effectuées pour la mise en place des équations, ainsi que des paramètres pris en compte.

II.1 - Introduction

La modélisation du comportement plastique des matériaux se base sur deux hypothèses importantes, Halphen & Salençon (1987). La première hypothèse est l'existence d'un critère de plasticité, généralisant la notion de seuil de plasticité mise en évidence dans les expériences en sollicitations uniaxiales. Pour caractériser l'écoulement plastique d'un matériau, on introduit une fonction potentielle, à laquelle est relié directement le taux de déformation plastique. Dans la seconde hypothèse, on admet que pour les métaux, et les matériaux stables en général, la surface de plasticité coïncide avec ce potentiel. L'évolution de la surface de plasticité durant l'écoulement plastique permet d'achever l'élaboration de la loi de comportement.

Pour un matériau n'ayant subi aucune prédéformation, il est relativement simple d'approcher la surface de plasticité initiale correspondante. Les critères de Von Mises et de Tresca, présentés dans ce chapitre, permettent d'obtenir une approximation en bonne corrélation avec les données expérimentales. Il en est différemment après un chargement, où la surface de plasticité du matériau évolue de façon significative lors de l'écoulement plastique, et possède une forme géométrique plus complexe, comme le montre les figures du chapitre IV, issues d'essais expérimentaux. On introduit ensuite différents modèles phénoménologiques destinés à établir les lois élastoplastiques reliant la contrainte à la déformation. La modélisation considérée ici est réalisée pour des matériaux métalliques dans le cadre des petites transformations. On détaille en particulier les modèles élémentaires, encore largement utilisés dans la plupart des codes d'éléments finis.

II.2 - Bases théoriques de la plasticité phénoménologique

II.2.1 - Introduction

En tout point d'un milieu continu, l'état de contrainte est défini par un tenseur symétrique du second ordre et de composantes σ_{ij} . Grâce à cette symétrie, on peut montrer, voir par exemple Frederick & Chang (1965), qu'en chacun de ces points il existe trois plans perpendiculaires deux à deux, appelés plans principaux, pour lesquels les contraintes de cisaillement sont nulles, et les contraintes normales, appelées contraintes principales sont notés σ_1 , σ_2 et σ_3 . Celles-ci sont les racines de l'équation caractéristique définie par :

$$\sigma^3 - I_1 \sigma^2 + I_2 \sigma - I_3 = 0 \quad (\text{II.1})$$

où I_1, I_2, I_3 sont des quantités scalaires dont la valeur est indépendante de la rotation du repère de référence. Ce sont les invariants du tenseur des contraintes, définis par :

$$I_1 = \sigma_{ii} \quad I_2 = \frac{1}{2} (\sigma_{ij} \sigma_{ij} - \sigma_{ii} \sigma_{jj}) \quad I_3 = \det [\sigma_{ij}] \quad (\text{II.2})$$

L'invariant I_1 correspond à l'action de la pression hydrostatique, pour laquelle des observations expérimentales, réalisées notamment par Bridgeman (1952), ont permis de constater qu'elle ne peut être à l'origine d'une déformation plastique des matériaux métalliques. Pour cette raison, en plasticité on est alors amené à décomposer le tenseur des contraintes en une partie sphérique décrivant les contraintes hydrostatiques, et une partie déviatorique complémentaire déterminée par :

$$S_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \sigma_{kk} \quad (\text{II.3})$$

Les invariants du déviateur des contraintes, notés J_1, J_2, J_3 sont alors :

$$J_1 = 0 \quad J_2 = \frac{1}{2} S_{ij} S_{ij} \quad J_3 = \det [S_{ij}] \quad (\text{II.4})$$

Remarque : L'invariant J_2 est proportionnel à la contrainte de cisaillement s'exerçant sur le plan octaédrique. La décomposition en partie sphérique et partie déviatorique peut aussi être réalisée pour le tenseur des déformations, où la partie sphérique est représentative du changement de volume.

En plasticité, dans le cadre des petites transformations, on décompose le taux de déformations en une partie élastique et une partie plastique :

$$d\varepsilon_{ij} = d\varepsilon_{ij}^e + d\varepsilon_{ij}^p \quad (\text{II.5})$$

La déformation élastique est réversible, et peut être reliée à la contrainte par une loi linéaire pour la plupart des métaux en introduisant le tenseur des constantes élastiques C_{ijkl} :

$$d\sigma_{ij} = C_{ijkl} d\varepsilon_{kl}^e \quad (\text{II.6})$$

En ce qui concerne la déformation plastique, phénomène irréversible, elle ne peut être reliée directement à la contrainte et dépend de l'histoire du chargement imposé au matériau. Ces deux grandeurs sont alors reliées par une loi incrémentale, qui dépend du type d'écoulement considéré lors de l'écoulement plastique. Cet écoulement s'initie lorsque la contrainte atteint une valeur seuil, ce qui se traduit, en considérant le tenseur des contraintes, par une surface dans un hyperespace à six dimensions, et s'écrit sous une forme générale :

$$F(\sigma_{ij}) = 0 \quad (\text{II.7})$$

Si le matériau est isotrope, la surface de plasticité dépend uniquement des contraintes principales. Pour un tel matériau le critère de plasticité est représenté par une surface dans l'espace des contraintes principales, dont l'équation est :

$$F(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = 0 \quad \text{ou} \quad F(I_1, I_2, I_3) = 0 \quad (\text{II.8})$$

Dans le cas d'un matériau métallique, la pression hydrostatique n'engendre pas de déformation plastique, elle n'a donc aucun effet sur le critère de plasticité, qui est alors relié uniquement au déviateur des contraintes :

$$F(J_2, J_3) = 0 \quad (\text{II.9})$$

II.2.2 - Critères de plasticité

◆ Critère de Tresca (1864)

Avec ce critère, l'écoulement plastique commence quand la contrainte maximale de cisaillement atteint une valeur critique, et peut s'exprimer en fonction des contraintes principales :

$$\tau_{max} = \frac{1}{2}(\sigma_1 - \sigma_3) = k \quad \text{avec} \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \quad (\text{II.10})$$

où k est un paramètre qui dépend du matériau et se détermine expérimentalement. Dans l'espace des contraintes principales, la surface de plasticité définie par le critère de Tresca est représentée par un cylindre infini à base hexagonale et d'axe d'équation $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$, *figure II.1*

◆ Critère de Von Mises (1913)

Basé sur un concept énergétique et initialement publié par Huber (1904), ce critère suppose que l'écoulement plastique s'initie lorsque le second invariant du déviateur des contraintes atteint une valeur critique k^2 fonction du matériau, et s'écrit alors :

$$J_2 = k^2 \quad (\text{II.11})$$

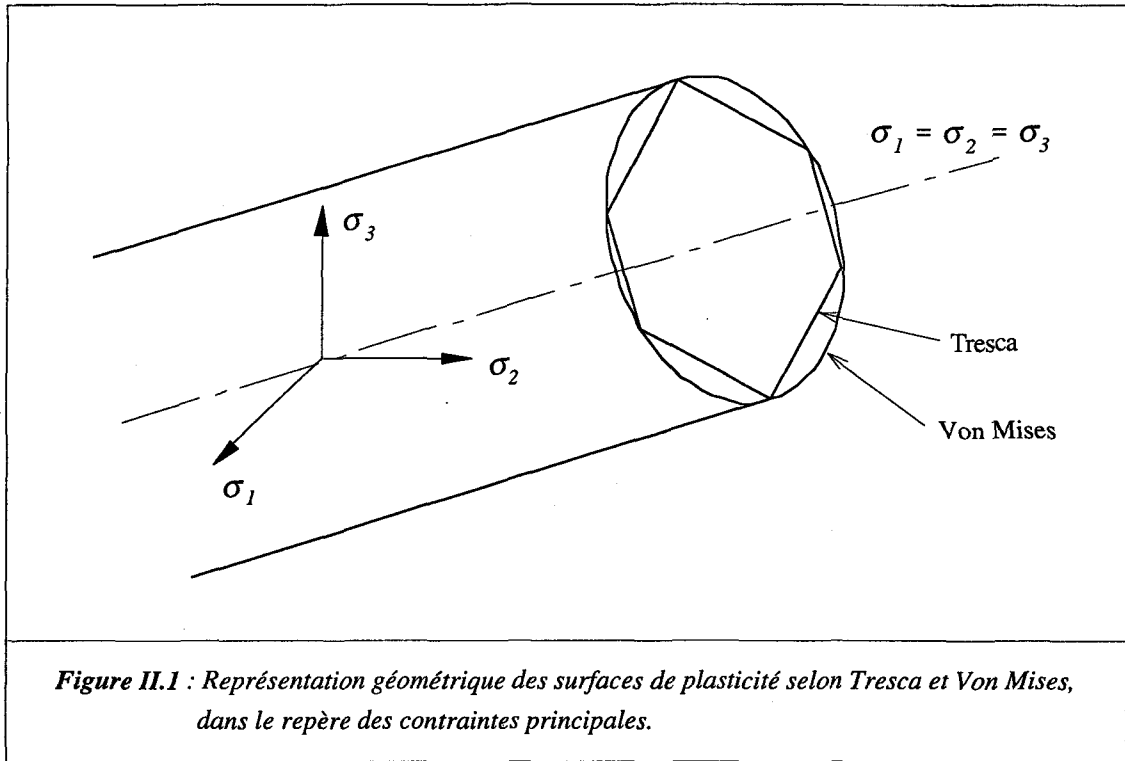
En introduisant la contrainte équivalente σ_e , on obtient :

$$\sigma_e = (3 J_2)^{1/2} = \sqrt{3} k \quad (\text{II.12})$$

Ce critère peut se représenter, dans l'espace des contraintes principales, par un cylindre à base circulaire et d'axe d'équation $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$, *figure II.1*.

Sur la *figure II.1*, on constate une faible différence entre les deux critères définis précédemment. La différence est maximale dans le cas d'un cisaillement pur. Dans ce cas, le critère de Von Mises fournit une valeur de la contrainte de cisaillement critique supérieure de 15 % à celle issue du critère de Tresca. D'après des études menées par Lianis & Ford (1957), le critère de Von Mises permet de prédire le début de l'écoulement plastique des métaux avec plus de précision, par rapport aux données

expérimentales, que le critère de Tresca. De plus, la surface de plasticité définie par Von Mises ne présente pas de “coins”, ce qui conduit à des relations plus simples entre contraintes et déformations.



◆ Critères de plasticité pour les matériaux anisotropes

Les premières études sur les critères anisotropes ont été réalisées par Jackson et *al.* (1948), Hill (1948^b) et Dorn (1949). Initialement, ils modifièrent les critères de Tresca ou Von Mises en y ajoutant des constantes supplémentaires, intrinsèques au matériau. On peut citer en exemple le critère de Hill (1950) concernant les matériaux orthotropes :

$$F(\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + G(\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + H(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + 2L\sigma_{23}^2 + 2L\sigma_{31}^2 + 2L\sigma_{12}^2 - 1 = 0 \quad (\text{II.13})$$

où F, G, H, L, M, N sont des paramètres à déterminer expérimentalement et s'expriment en fonction des seuils de plasticité en traction et cisaillement, respectivement suivant les directions principales d'orthotropie. D'autres critères ont été proposés, notamment par Barlat & Lian (1989), Hill (1950), applicables pour des conditions de contraintes planes.

L'expression du critère de plasticité d'un matériau anisotrope peut se généraliser sous la forme suivante, voir par exemple Khan & Huang (1995) :

$$F(\sigma_{ij}, M_{ijkl}) = 0 \quad (\text{II.14})$$

où M_{ijkl} est le tenseur caractérisant l'anisotropie du matériau.

Des critères de plasticité concernant les matériaux anisotropes et utilisant un tel tenseur peuvent être trouvés dans Boehler & Sawczuk (1968), Boehler (1975), ou Betten (1988).

II.2.3 - Loi d'écoulement plastique

La théorie de la plasticité introduit pour formulation de base, une fonction potentielle de l'écoulement plastique. Proposée par Von Mises, la fonction potentielle $Q(\sigma_{ij})$ permet de relier l'incrément de déformation plastique au tenseur des contraintes, par l'équation suivante[†] :

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{\partial Q}{\partial \sigma_{ij}} d\lambda \quad (\text{II.15})$$

où $d\lambda$ est un scalaire de proportionnalité, exprimant l'amplitude de l'écoulement plastique et se détermine à l'aide du critère de plasticité pris en compte.

Dans le cadre de la théorie de la plasticité associée, on fait l'hypothèse que le potentiel peut être substitué par la fonction décrivant la surface de plasticité définie par l'équation (II.7). La relation (II.15) devient alors :

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}} d\lambda \quad (\text{II.16})$$

Par cette formulation, on suppose que le vecteur représentant l'incrément de déformation plastique est normal à la surface de plasticité. Cette hypothèse peut être vérifiée empiriquement, pour laquelle les observations expérimentales montrent que l'écoulement plastique des métaux est bien caractérisé par l'équation (II.16). Cette équation est utilisée pour la mise en place des relations entre contraintes et déformations, qui sont, dans ce chapitre, exclusivement phénoménologiques. Décrivant un processus physique, ces relations doivent alors être en accord avec les lois de la thermodynamique. Prager (1949) énonce les conditions que doivent vérifier les relations élastoplastiques.

[†] Dans l'équation (II.15), on fait l'hypothèse que l'énergie de déformation élastique emmagasinée dans le matériau n'affecte pas la déformation plastique.

◆ **Condition de continuité**

La condition de continuité a son importance quant en un point du matériau, l'état de contrainte est situé sur la surface de plasticité. A partir de là, plusieurs évolutions sont possibles. Si le vecteur d'incrément des contraintes est dirigé vers l'extérieur de la surface de plasticité, cela produit un incrément de déformation plastique et constitue un chargement. Dans le cas où ce vecteur est dirigé vers l'intérieur de la surface, on a un déchargement pour lequel l'incrément de déformation plastique est nul. La condition de continuité intervient lorsque le vecteur incrément de contrainte est tangent à la surface. Dans cette situation, on doit avoir un chargement neutre où l'incrément de déformation plastique est nul. Le sens du vecteur incrément des contraintes est obtenu par le signe du produit scalaire de celui-ci avec le vecteur normal à la surface de plasticité, proportionnel à $\frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}}$.

Les trois cas, précédemment cités, sont représentés schématiquement sur la *figure II.2*, et sont définis par les relations suivantes :

◆ Cas d'un chargement actif

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} > 0 & \quad \text{on a} \quad d\varepsilon_{ij}^p > 0 \\ \text{donc, d'après (II.16) :} & \quad d\lambda > 0 \end{aligned} \quad (\text{II.17})$$

◆ Cas d'un chargement neutre

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} = 0 & \quad \text{on a} \quad d\varepsilon_{ij}^p = 0 \\ \text{donc} & \quad d\lambda = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

◆ Cas d'un déchargement

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} < 0 & \quad \text{on a} \quad d\varepsilon_{ij}^p = 0 \\ \text{donc} & \quad d\lambda = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

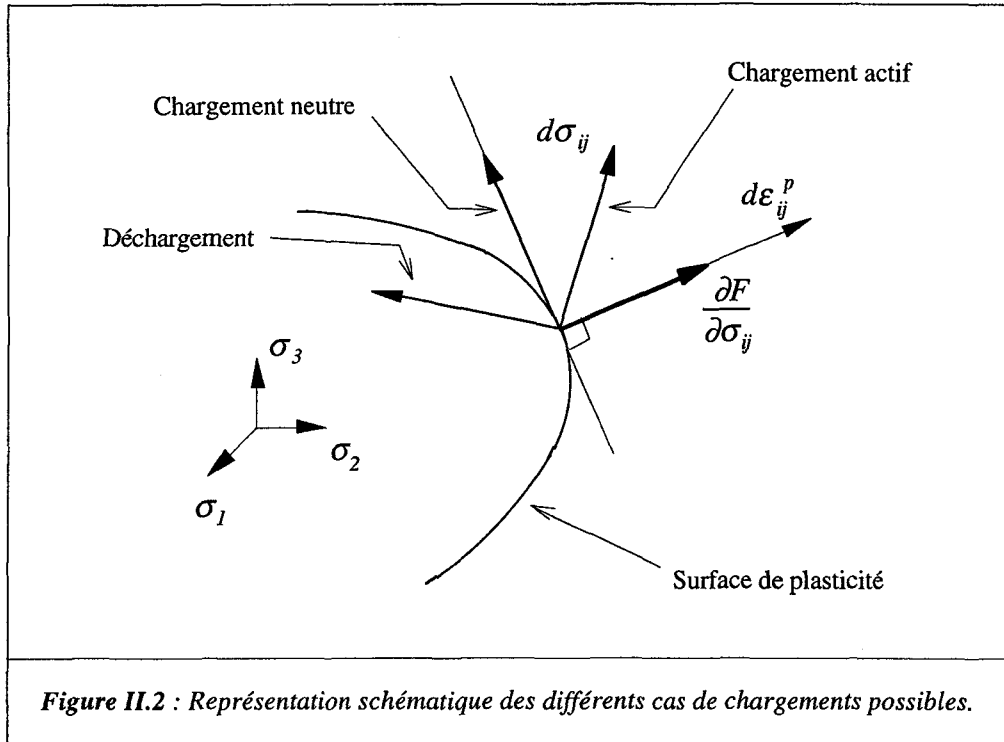


Figure II.2 : Représentation schématique des différents cas de chargements possibles.

◆ Condition de consistance

Au cours d'une déformation plastique, la surface de plasticité évolue en taille et en forme. La condition de consistance est vérifiée si l'état de contrainte lors de l'écoulement plastique est toujours situé sur la surface. Cela a pour conséquence que la relation (II.7) est toujours valable lors d'un chargement. En différentiant cette équation, nous obtenons :

$$dF = 0 \quad (\text{II.20})$$

◆ Condition d'irréversibilité et de stabilité

La déformation plastique étant un processus irréversible, la seconde loi de la thermodynamique nous impose d'avoir une entropie positive. Dans son postulat, Drucker (1950) applique ce principe à la stabilité plastique d'un matériau. La condition de stabilité[†] est définie lors d'un chargement monotone ou cyclique, pour lequel le travail plastique doit être positif :

$$\sigma_{ij} d\epsilon_{ij}^p > 0 \quad (\text{II.21})$$

[†] La condition de stabilité est aussi connu sous l'appellation du principe de travail plastique maximum, Von Mises (1928), Hill (1948^a).

Drucker (1951) a montré que cette relation impose une surface de plasticité nécessairement convexe. De plus, si le matériau obéit au critère de stabilité, il vérifie alors la condition d'unicité. Celle-ci est définie par des trajectoires uniques en contraintes $\sigma_{ij}(t)$ et en déformation $\varepsilon_{ij}(t)$, pour un chargement donné. La corrélation entre la condition de stabilité et la condition d'unicité a été prouvée indépendamment par Drucker (1956) et Hill (1956).

II.3 - Relations élastoplastiques contrainte - déformation

Nous présentons ici les relations mathématiques entre contrainte et déformation concernant la plasticité des matériaux métalliques en petites déformations. Nous détaillons en particulier les modèles élémentaires, encore amplement utilisés par les codes d'éléments finis, et basés sur l'hypothèse de l'écrouissage isotrope ou cinématique.

II.3.1 - Ecrouissage isotrope

Si l'on considère un écrouissage isotrope, la surface de plasticité évolue de façon homothétique lors de l'écoulement plastique, elle conserve sa forme initiale ainsi que son orientation, Hill (1950), Hodge (1955). Cette évolution est schématisée sur la *figure II.3*.

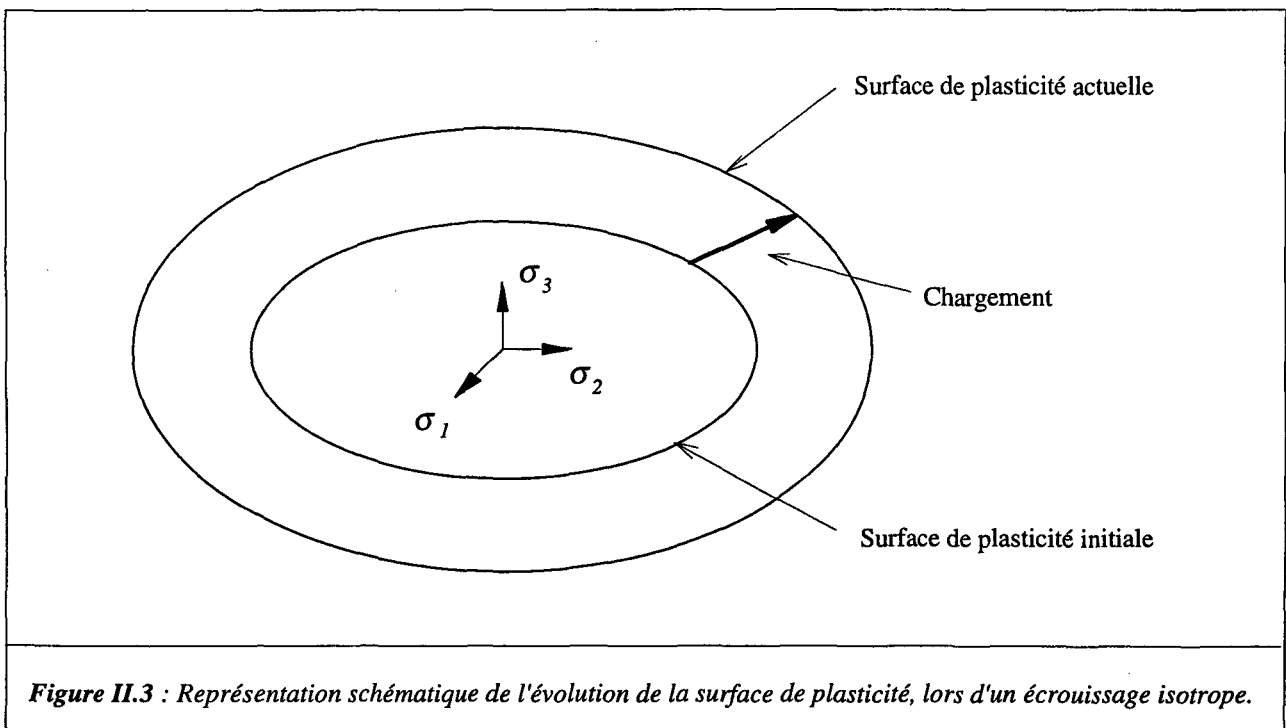


Figure II.3 : Représentation schématique de l'évolution de la surface de plasticité, lors d'un écrouissage isotrope.

L'équation (II.14) caractérisant de façon générale la surface de plasticité, s'écrit dans le cas d'un écrouissage isotrope :

$$F(\sigma_{ij}, \kappa) = f(\sigma_{ij}) - k(\kappa) = 0 \quad (\text{II.22})$$

où f représente la forme de la surface et k détermine sa taille. Le paramètre κ caractérise l'écrouissage du matériau et se définit généralement comme étant l'accumulation de la déformation plastique équivalente :

$$\kappa = \int d\varepsilon_e^p = \int \left(\frac{2}{3} d\varepsilon_{ij}^p d\varepsilon_{ij}^p \right)^{1/2} \quad (\text{II.23})$$

Il existe une autre expression du paramètre d'écrouissage. Défini énergétiquement, le paramètre κ est égal au travail plastique total :

$$\kappa = \int \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^p \quad (\text{II.24})$$

Dans le cas d'un écrouissage isotrope caractérisé par (II.22), la condition de consistance définie par la relation (II.20) devient alors :

$$dF = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - \frac{\partial k}{\partial \kappa} d\kappa = 0 \quad (\text{II.25})$$

De plus, l'équation (II.16) de l'écoulement plastique se réécrit :

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\lambda \quad (\text{II.26})$$

En considérant (II.23) et (II.26), la relation (II.25) devient :

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - \frac{dk}{d\varepsilon_e^p} \left(\frac{2}{3} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \right)^{1/2} d\lambda = 0 \quad (\text{II.27})$$

Soit H le module d'érouissage, défini par :

$$H = \frac{dk}{d\varepsilon_e^p} \left(\frac{2}{3} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \right)^{1/2} \quad (\text{II.28})$$

On détermine maintenant l'incrément de contrainte $d\sigma_{ij}$ à partir de l'équation (II.6), où l'on prend en compte les relations (II.5) et (II.26), ce qui conduit à :

$$d\sigma_{ij} = C_{ijkl} (d\varepsilon_{kl} - d\varepsilon_{kl}^p) = C_{ijkl} \left(d\varepsilon_{kl} - \frac{\partial f}{\partial \sigma_{kl}} d\lambda \right) \quad (\text{II.29})$$

L'expression du paramètre $d\lambda$ est obtenue en introduisant (II.28) et (II.29) dans (II.27) :

$$d\lambda = \frac{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijkl} d\varepsilon_{kl}}{H + \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijkl} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{kl}}} \quad (\text{II.30})$$

En insérant (II.30) dans l'équation (II.29), on a finalement la relation entre l'incrément de déformation et l'incrément de contrainte, qui s'écrit :

$$d\sigma_{ij} = l_{ijkl} d\varepsilon_{kl} \quad (\text{II.31})$$

où l_{ijkl} sont les composantes du tenseur élastoplastique, définit par :

$$l_{ijkl} = C_{ijkl} - \frac{C_{ijmn} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{op}} C_{opkl}}{H + \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijmn} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}}} \quad (\text{II.32})$$

Nayak & Zienkiewicz (1972) ont formulé les composantes $\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}}$ en fonction de l'état de contrainte. Bien sûr, ces composantes dépendent aussi du critère de plasticité utilisé (Tresca, Von Mises), et leurs expressions peuvent être trouvées dans Owen & Hinton (1980).

II.3.2 - Ecouissage cinématique

La notion d'écouissage cinématique a été introduit par Ishlinski (1954) et Prager (1956^a). La surface de plasticité évolue dans ce cas uniquement par translation, comme cela est schématisé sur la figure II.4.

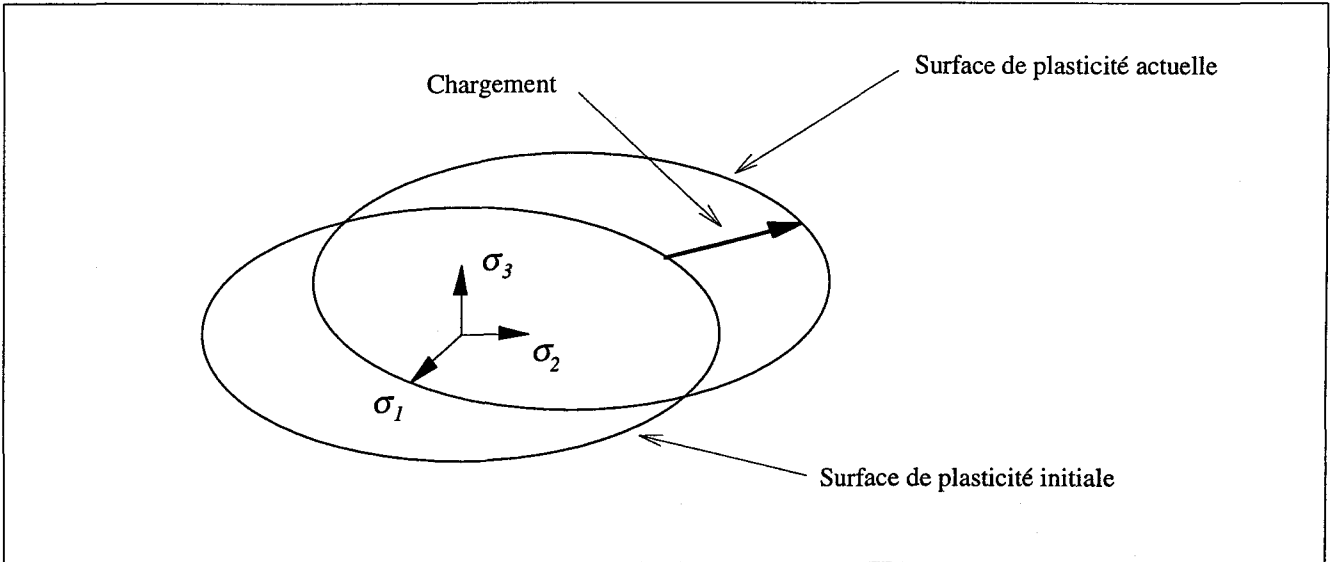


Figure II.4 : Représentation schématique de l'évolution de la surface de plasticité, lors d'un écouissage cinématique.

Dans le cadre d'un écouissage cinématique, la surface de plasticité s'écrit :

$$F = f(\sigma_{ij} - \alpha_{ij}) - \sigma_0 = 0 \quad (\text{II.33})$$

où α_{ij} sont les paramètres d'écouissage et représentent la position du centre de la surface de plasticité dans l'espace des contraintes. La constante σ_0 caractérise le matériau et définit la taille de la surface. En appliquant la condition de consistance à la relation (II.33), on obtient :

$$dF = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} + \frac{\partial f}{\partial \alpha_{ij}} d\alpha_{ij} = 0 \quad (\text{II.34})$$

La mise en place de la loi élastoplastique requiert de connaître l'évolution des composantes α_{ij} lors de l'écouissage.

♦ Prager (1956^b) a postulé que la surface de plasticité se translate dans la direction de la normale extérieure définie au point caractéristique de l'état de contrainte. Par conséquent, l'écroutissage s'effectue suivant l'incrément de déformation plastique, ce qui implique que l'on a :

$$d\alpha_{ij} = c d\varepsilon_{ij}^p \quad (\text{II.35})$$

où c est une constante intrinsèque au matériau.

De plus, f est fonction de la quantité $\sigma_{ij} - \alpha_{ij}$, ce qui se traduit par :

$$\frac{\partial f}{\partial \alpha_{ij}} = - \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \quad (\text{II.36})$$

La relation (II.34) se réécrit alors :

$$(d\sigma_{ij} - d\alpha_{ij}) \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} = 0 \quad (\text{II.37})$$

En considérant successivement les relations (II.35), (II.16) et (II.33), on obtient :

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - c d\varepsilon_{ij}^p \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - c \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\lambda = 0 \quad (\text{II.38})$$

On définit le module d'écroutissage H :

$$H = c \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \quad (\text{II.39})$$

Par la suite, l'expression du paramètre $d\lambda$ est identique à celle obtenue pour un écroutissage isotrope :

$$d\lambda = \frac{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijkl} d\varepsilon_{kl}}{H + \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijkl} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{kl}}} \quad (\text{II.40})$$

de même pour les modules élastoplastiques :

$$l_{ijkl} = C_{ijkl} - \frac{C_{ijmn} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{op}} C_{opkl}}{H + \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijmn} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}}} \quad (\text{II.41})$$

Shield & Ziegler (1958) ont montré que la loi d'érouissage définie par Prager présente une incohérence des résultats entre les cas deux dimensions et les cas trois dimensions. En effet, si l'on met en place un modèle pour lequel la surface de plasticité se translate suivant sa normale dans un espace 3D, alors, reporté dans un espace 2D, la surface n'évoluera pas dans la même direction.

♦ La loi d'érouissage cinématique définie par Ziegler (1959) suppose que la surface de plasticité se translate suivant la direction du vecteur reliant le centre de la surface au point caractéristique de l'état de contrainte. Dans ce cas la relation (II.35) est remplacée par :

$$d\alpha_{ij} = d\mu (\sigma_{ij} - \alpha_{ij}) \quad (\text{II.42})$$

où $d\mu$ est un scalaire déterminé à partir du critère de plasticité pris en compte. La condition de consistance, défini dans le cas d'un érouissage cinématique par la relation (II.34), permet en introduisant (II.42) d'obtenir l'expression du scalaire $d\mu$:

$$d\mu = \frac{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij}}{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} (\sigma_{ij} - \alpha_{ij})} \quad (\text{II.43})$$

Dans ce cas la condition de consistance ne permet pas de déterminer l'expression de $d\lambda$. En effet, d'après l'équation (II.42), l'évolution des paramètres d'érouissage α_{ij} n'est pas reliée directement à la déformation plastique ε_{ij}^p (ni à l'incrément $d\varepsilon_{ij}^p$), alors $d\varepsilon_{ij}^p$ ne se retrouve pas dans la condition de consistance. Il est nécessaire ici d'introduire un module plastique, noté K_p , qui représente le facteur de proportionnalité entre le vecteur normal à la surface de plasticité et l'incrément plastique, tel que :

$$\frac{1}{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} = K_p d\varepsilon_{ij}^p \quad (\text{II.44})$$

En comparant cette équation à la relation (II.16), on obtient l'expression du paramètre $d\lambda$:

$$d\lambda = \frac{1}{K_p} \frac{1}{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}}} \quad (\text{II.45})$$

La relation (II.29) entre l'incrément de contrainte $d\sigma_{ij}$ et le taux de déformation $d\varepsilon_{ij}$ s'écrit donc :

$$d\sigma_{ij} = C_{ijkl} \left(d\varepsilon_{kl} - \frac{1}{K_p} \frac{1}{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{kl}} \right) \quad (\text{II.46})$$

On peut montrer, voir par exemple Khan & Huang (1995), que si l'on considère le critère d'écroutissage de Von Mises, on obtient :

$$K_p = c \quad (\text{II.47})$$

où c est la constante issue de la loi d'écroutissage cinématique mise en place par Prager.

II.3.3 - Ecroutissage mixte

L'écroutissage mixte se caractérise par une expansion de la surface de plasticité (écroutissage isotrope) combinée à une translation (écroutissage cinématique), Edelman & Drucker (1951), Hodge (1957). Dans un souci de simplification, on considère ici uniquement le modèle d'écroutissage cinématique de Prager, la surface de plasticité est alors définie par l'équation suivante :

$$F = f(\sigma_{ij} - \alpha_{ij}) - k(\kappa) = 0 \quad (\text{II.48})$$

où les composantes α_{ij} représentent la position de la surface et k détermine sa taille. Dans ce cas la condition de consistance (II.20) s'écrit :

$$dF = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} + \frac{\partial f}{\partial \alpha_{ij}} d\alpha_{ij} - \frac{\partial k}{\partial \kappa} d\kappa = 0 \quad (\text{II.49})$$

En considérant le paramètre d'érouissage $d\kappa$ défini par (II.23), et la relation (II.35) caractérisant la loi d'érouissage cinématique de Prager, ainsi que les relations (II.36) et (II.26), l'équation (II.49) devient alors :

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - c \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\lambda - \frac{dk}{d\varepsilon_e^p} \left(\frac{2}{3} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \right)^{1/2} d\lambda = 0 \quad (\text{II.50})$$

On définit le module d'érouissage H par l'expression suivante :

$$H = c \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} + \frac{dk}{d\varepsilon_e^p} \left(\frac{2}{3} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \right)^{1/2} \quad (\text{II.51})$$

Si l'on compare cette expression avec les équations (II.28) et (II.39), on remarque que la relation entre les différents modules d'érouissage présentés s'écrit simplement :

$$H(\text{mixte}) = H(\text{cinématique}) + H(\text{isotrope}) \quad (\text{II.52})$$

On retrouve par la suite les expressions précédemment établies, qui sont pour le paramètre $d\lambda$:

$$d\lambda = \frac{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijkl} d\varepsilon_{kl}}{H + \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijkl} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{kl}}} \quad (\text{II.53})$$

et pour les modules élastoplastiques :

$$l_{ijkl} = C_{ijkl} - \frac{C_{ijmn} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{op}} C_{opkl}}{H + \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} C_{ijmn} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}}} \quad (\text{II.54})$$

II.3.4 - Autres modèles d'érouissage

Si les modèles d'érouissage présentés précédemment offrent une réponse correcte du comportement plastique des matériaux lors d'un chargement évoluant de façon proportionnelle, ils sont cependant tout à fait inadaptés pour les cas de chargements complexes, par exemple, les chargements cycliques multiaxiaux. Une telle étude est relativement problématique, et nous ne développerons pas ici les différents modèles que l'on peut trouver dans la littérature. On peut toutefois citer le modèle à surfaces multiples de Mroz (1967), ou bien celui à deux surfaces de Dafalias & Popov (1976), ou encore le modèle à érouissage cinématique non linéaire introduit par Armstrong & Frederick (1966) et développé par Chaboche (1986). Plus récemment, Ishikawa (1999) a proposé un modèle en grande transformation, basé sur le critère de l'érouissage cinématique. Les différents modèles que l'on peut trouver en plasticité phénoménologique se distinguent par leur complexité ainsi que par leur aptitude à déterminer correctement la réponse élastoplastique d'un matériau soumis à un chargement.

II.4 - Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons présenté les modèles élastoplastiques élémentaires basés sur une approche phénoménologique. La mise en place de ces modèles lors de chargements monotones permet d'obtenir des résultats en bonne corrélation avec les données expérimentales. Leur fiabilité est plus discutable dans les cas de chargements complexes. En effet, dans le chapitre IV, les résultats d'essais expérimentaux montrent que la surface de plasticité subit une forte distorsion géométrique lors de l'érouissage du matériau considéré. La forme de cette nouvelle surface a toute son importance lorsque l'on change le trajet de chargement (par exemple un essai de traction-torsion). Lors de la modélisation de l'emboutissage d'une tôle, Lian et *al.* (1989) ont montré l'intérêt de bien décrire la surface de plasticité. Comme nous le verrons dans les chapitres suivants, c'est la microstructure du matériau qui est à l'origine de sa géométrie relativement complexe.

Les modèles présentés ici ne prennent pas en compte les paramètres physiques de la microstructure, ils s'appuient uniquement sur des observations macroscopiques du comportement du matériau. C'est pourquoi ils sont incapables de reproduire correctement l'évolution de la surface de plasticité. Néanmoins, leur simplicité et leur efficacité dans le cas de chargement monotone, font qu'ils sont largement utilisés dans la plupart des codes d'éléments finis. Mais ces modèles sont essentiellement basés sur une hypothèse d'isotropie du matériau, et d'après Chung & Shah (1992), il

existe très peu de développements de critères de plasticité anisotrope qui soient précis et assez simples pour l'implantation numérique.

Dans le chapitre III, on présente l'approche cristallographique, dont les équations caractérisent l'évolution des variables déjà introduites ici (contraintes, déformations, modules d'écrouissage, etc.), mais établies à partir des phénomènes microstructuraux (glissements de plans cristallographiques, évolution de la texture, etc.).

Références Bibliographiques

- Armstrong, P., J., Frederick, C., O., (1966), A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect, G.E.G.B. Report RD/B/N 731.
- Barlat, F., Lian, J., (1989), Int. J. Plasticity, 5, p. 51.
- Betten, J., (1988), Int. J. Plast., 4, p. 29.
- Boehler, J., P., (1975), Thèse d'habilitation, Université Scientifique et Médicale de Grenoble.
- Boehler, J., P., Sawczuk, A., (1968), Journal de Mécanique, Vol. 9, 1, p. 5-33.
- Bridgeman, P., W., (1952), Studies in Large Plastic Flow and Fracture, Mc Graw - Hill, New York.
- Chaboche, J., L., (1986), Int. J. Plast., 2, p. 149.
- Chung, K., Shah, K., (1992), Int. Journal of Plasticity, 8, pp. 453-476.
- Dafalias, Y., F., Popov, E., P., (1976), J. Appl. Mech., 28, p. 645.
- Dawson, P., Beaudouin, A., Mathur, K., Sarma, G., (1994), Revue européennes des éléments finis, Vol. 3, n° 4, pp. 543-571.
- Dorn, J., E., (1949), J. Appl. Phys., 20, p. 15.
- Drucker, D., C., (1950), Quart. Appl. Math., Vol. 7, pp. 411-418.
- Drucker, D., C., (1951), Proc. 1st U.S. Nat. Cong. Appl. Mech., pp. 487-491.
- Drucker, D., C., (1956), Quart. Appl. Math., Vol. 14, p. 35.
- Edelman, F., Drucker, D., C., (1951), J. Franklin Institute, Vol. 251, pp. 581-605.
- Frederick, D., Chang, T., S., (1965), Continuum Mechanics, Scientific Publishers.
- Halphen, B., Salençon, J. (1987), Cours de calcul des structures anélastiques. Presse de l'Ecole National des Ponts et Chaussée.
- Hill, R., (1948^a), Quart. J. Mech. Math., Vol 1, pp. 18-28.
- Hill, R., (1948^b), Proc. R. Soc. Lond., A 193, p. 281.
- Hill, R., (1950), The Mathematical Theory of Plasticity, Oxford, University Press.
- Hill, R., (1956), J. Mech. Phys. Solids, Vol. 4, pp. 247-255.
- Hill, R., (1990), J. Mech. Phys. Solids, 38, p. 405.
- Hodge, P., G., Jr., (1955), Symp. IUTAM, Berlin, Springer - Verlag, pp. 147-170.
- Hodge, P., G., Jr., (1957), Discussion on Ref. 1 of Chapt. 5, J. Appl. Mech., Vol. 79, pp. 482-484.
- Huber, M., T., (1904), Czasopismo Techniczne, 22, Lemberg, Austria, p. 181.
- Ishikawa, H., (1999), Int. J. Plasticity, 15, pp. 299-317.
- Ishlinski, A., (1954), Mat. Zh., 6, p. 314.

- Jackson, L., R., Smith, K., F., Lankford, W., T.,** (1948), Plastic flow in anisotropic sheet metal, Technology Technical Publication.
- Khan, A., S., Huang, S.,** (1995), Continuum Theory of Plasticity, Wiley - Interscience Publication, NY.
- Lian, J., Barlat, F., Baudelet, B.,** (1989), Int. J. Plasticity , 5, pp. 131-147.
- Lianis, G., Ford, H.,** (1957), J. Mech. Phys. Solids, 5, p. 215.
- Mroz, Z.,** (1967), J. Mech. Phys., Vol. 15, pp. 163-212.
- Nayak, G., C., Zienkiewicz, O., C.,** (1972), Journ. of the Struct. Div. Proc. of A.S.C.E., pp. 949-953.
- Owen, D., R., J., Hinton, E.,** (1980), Finite Elements in Plasticity, Departement of Civil Engineering University College of Swansea, UK.
- Prager, W.,** (1949), J. Appl. Phys., Vol 20, N° 3, pp. 235-241.
- Prager, W.,** (1956^a), J. Appl. Mech. Trans. ASME., 78, p. 493.
- Prager, W.,** (1956^b), J. Appl. Mech., Vol. 23, pp. 493-496.
- Saint - Venant, B.,** (1870), C.R. Acad. Sci., 70, Paris, p. 473.
- Shield, R., Ziegler, H.,** (1958), Z. Angow. Math. Phys., 9a, p. 260.
- Tresca, H.,** (1864), C.R. Acad. Sci., 59, Paris, p. 754.
- Von Mises, R.,** (1913), Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, p. 582.
- Von Mises, R.,** (1928), ZAMM, Vol. 8, p. 161-185.
- Ziegler, H.,** (1959), Quart. appl. Math., Vol. 17, pp. 55-60.

CHAPITRE III

PLASTICITE DU

POLYCRISTAL

Ce chapitre est consacré à la description du comportement élastoplastique des matériaux polycristallins. En premier lieu, on met en place les lois élastoplastiques du monocristal, suivies d'une transition d'échelle permettant de relier les variables microscopiques et macroscopiques. On introduit alors l'équation intégrale évaluée à l'aide d'une approche autocohérente. Comme pour le chapitre II, les calculs sont effectués dans le cadre des petites transformations.

III.1 - Introduction

La structure de la loi de comportement élastoplastique à l'échelle mésoscopique, qui correspond à l'échelle granulaire pour les matériaux polycristallins, a été définie en petite déformation par Mandel (1965) et Hill (1966), et élargie au cas des transformations finies par Hill & Rice (1972). Elle est basée sur une hypothèse d'existence d'un nombre fini de mécanismes de déformation irréversible. Chaque mécanisme, identifié par une cinématique de déformation, obéit à sa propre fonction de charge. En général, la construction de cette loi est achevée en admettant la validité du principe du travail plastique maximal ou la règle de normalité, à l'échelle mésoscopique. On retrouve, sous ces hypothèses, la structure des équations de la théorie de plasticité phénoménologique exposée dans le chapitre précédent. En suivant l'approche classique de Mandel (1965) et Hill (1966), nous avons pour chaque mécanisme de déformation g :

- Le critère d'activation du mécanisme (II.22) :

$$F^g(\sigma_{ij}) = f^g(\sigma_{ij}) - k^g = R_{ij}^g \sigma_{ij} - \tau_c^g = 0 \quad (\text{III.1})$$

- La règle d'écoulement plastique associée (II.16) :

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{\partial f^g}{\partial \sigma_{ij}} d\lambda^g = R_{ij}^g d\gamma^g \quad (\text{III.2})$$

- La condition de consistance (II.20) :

$$dF^g = \frac{\partial f^g}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} - dk^g = R_{ij}^g d\sigma_{ij} - d\tau_c^g = 0 \quad (\text{III.3})$$

- La condition de continuité (II.17) à (II.19) :

$$\begin{aligned}
 \text{quand } F^g = 0 \quad \text{si } df^g \leq 0 \quad \text{alors } d\lambda^g = 0 \\
 \Rightarrow d\gamma^g = 0 \\
 \text{si } df^g > 0 \quad \text{alors } d\lambda^g > 0 \\
 \Rightarrow d\gamma^g > 0
 \end{aligned}
 \tag{III.4}$$

- La loi d'écrouissage (II.23) :

$$\begin{aligned}
 d\kappa^g &= \left(\frac{2}{3} \frac{\partial f^g}{\partial \sigma_{ij}} \frac{\partial f^g}{\partial \sigma_{ij}} \right)^{1/2} d\lambda^g \\
 \Rightarrow d\tau_c^g &= H^{gh} d\gamma^h
 \end{aligned}
 \tag{III.5}$$

Dans ces expressions, $d\gamma^g$ mesure le degré d'activité du mécanisme de déformation g , et R_{ij}^g définit la direction d'écoulement plastique du matériau. On remarque que la description phénoménologique de la loi de comportement est simplement transposée du niveau macroscopique à l'échelle granulaire. On peut alors s'interroger sur la question de préservation de la structure de ces équations incrémentales pendant l'opération de la transition d'échelle. Notamment en ce qui concerne la conservation de la règle de normalité au niveau macroscopique. En utilisant les tenseurs d'influence élastique, Petryk (1997) démontre que la loi de comportement possède la même structure que celle construite au niveau granulaire. On présente dans le chapitre IV, quelques vérifications numériques de cette règle.

Dans la suite de ce chapitre, nous spécifions le sens physique des équations présentées plus haut, dans le cas du mécanisme de déformation plastique correspondant au glissement multiple de plans cristallographiques géométriquement bien identifiés. Ce genre d'approches basées sur la connaissance des propriétés de chaque constituant débouchent sur une meilleure description des lois de comportement.

Les premiers modèles ont été proposés par Voigt (1889), Reuss (1929) et Hill (1965^a). Ils concernent le comportement linéaire pour lequel le développement des théories statistiques systématiques a permis d'obtenir des progrès considérables dans la compréhension du problème des matériaux microhétérogènes, Willis (1964), Dederichs & Zeller (1973), Kröner (1977). La situation est différente quant à la prévision des propriétés inélastiques telles que l'élastoplasticité des métaux polycristallins. Des modèles simples ont été proposés par Sachs (1928), Taylor (1938) et Zaoui (1970) et améliorés par Lin (1957), Honeff & Mecking (1978), Kocks & Canova (1986). Depuis des progrès ont été réalisés grâce à Kröner (1961), qui, en se basant sur le problème

de l'inclusion d'Eshelby (1957), a introduit les modèles autocohérents. Cette base a sans cesse été améliorée par Budiansky & Wu (1962), Hill (1965^b), Hutchinson (1964, 1970), et Berveiller & Zaoui (1980, 1984) qui ont proposé une nouvelle équation intégrale dans le cas de la déformation élastoplastique.

La déformation élastoplastique est à l'origine du changement de tout l'état microstructural et mécanique du polycristal. La modélisation micromécanique permet de prendre en compte un certain nombre de phénomènes présents au cours de la déformation. Si on veut prévoir le comportement macroscopique élastoplastique d'un matériau, il est nécessaire de connaître l'évolution de certains paramètres physiques, en fonction de la déformation plastique. On peut distinguer quatre grandes familles de paramètres, Lipinski (1993) :

- ◆ A l'échelle intracristalline, la multiplication des dislocations et l'évolution de leur répartition spatiale (création de cellules, parois, etc.) sont responsables de l'écrouissage intracristallin. Actuellement, ce phénomène est décrit par l'intermédiaire d'une matrice d'écrouissage, voir par exemple Franciosi (1984). L'étude de cette matrice est présentée lors de la description du comportement du monocristal.

- ◆ A l'échelle intercristalline (échelle des grains), par l'intermédiaire des incompatibilités du champ de déformation plastique, voire élastique pour les matériaux anisotropes, où la désorientation relative des réseaux cristallins crée des contraintes internes qui jouent un rôle essentiel dans la plasticité des matériaux polycristallins. Au cours de l'écoulement plastique, les contraintes internes se développent du fait des incompatibilités, se relaxent (au moins partiellement) grâce à l'accommodation plastique et contribuent ainsi au comportement élastoplastique macroscopique, qui se manifeste par un écrouissage anisotrope du matériau.

- ◆ A cette même échelle, le mécanisme de glissement plastique induit une rotation plastique, qui entraîne une rotation des réseaux cristallins, en relation avec les équations de compatibilités de Kröner (1958^a). Ce sont ces rotations qui sont à l'origine de la formation de textures cristallographiques de déformation, responsables de l'anisotropie du comportement élastoplastique du polycristal. Une analyse des effets associés aux incompatibilités intergranulaires a été effectuée par Berveiller (1978).

- ◆ Enfin, la déformation plastique engendre un changement de la forme et de l'orientation des grains. L'influence de cette texture morphologique sur la texture cristallographique a été démontrée par Van Houtte (1978), Honeff & Mecking (1978) et par Tiem et *al.* (1986) sur les contraintes

internes. La distribution spatiale, ou texture topologique, joue également un rôle important sur les textures et le niveau des contraintes internes.

Ces phénomènes se superposant lors de la déformation, il est nécessaire d'utiliser une approche permettant de suivre l'évolution des différents paramètres. Dans ce travail, on propose une approche autocohérente basée sur le principe d'homogénéisation. Cette méthode consiste à déterminer le comportement mécanique macroscopique d'un matériau polycristallin à partir des lois élastoplastiques du monocristal, par l'intermédiaire d'une transition d'échelle.

III.2 - Loi de comportement du monocristal

III.2.1 - Introduction

Un matériau polycristallin est formé par un assemblage de monocristaux constitués d'atomes arrangés périodiquement suivant un réseau, cubique ou hexagonal pour les aciers, et appelé réseau cristallographique. En 1912, Bragg utilise les rayons X pour étudier la structure des cristaux, qui peut être définie par un empilement de plans cristallographiques. Cette technique permet de montrer que la déformation plastique s'effectue par le glissement de plans denses, plans qui contiennent le plus grand nombre d'atomes par unité de surface. Ce mécanisme n'est possible qu'à condition que la contrainte appliquée soit supérieure à la cission critique du matériau, qui, si l'on suppose un glissement en bloc d'un plan par rapport à un autre, est de 100 à 10 000 fois supérieure aux limites élastiques mesurées expérimentalement. Cela implique l'existence d'un phénomène supplémentaire lors de la déformation plastique d'un cristal, qui, sauf précautions particulières, n'est jamais parfait et contient des défauts.

Initialement introduite par Volterra (1907) et Somigliana (1914), l'existence de singularités linéaires a été montrée indépendamment par Orowan (1934), Polanyi (1934) et Taylor (1934), et développèrent la notion de dislocation. La déformation plastique n'est donc pas le fait d'un cisaillement global des liaisons atomiques, mais résulte du passage de dislocations dans le plan de glissement, comme le montre la *figure III.1*.

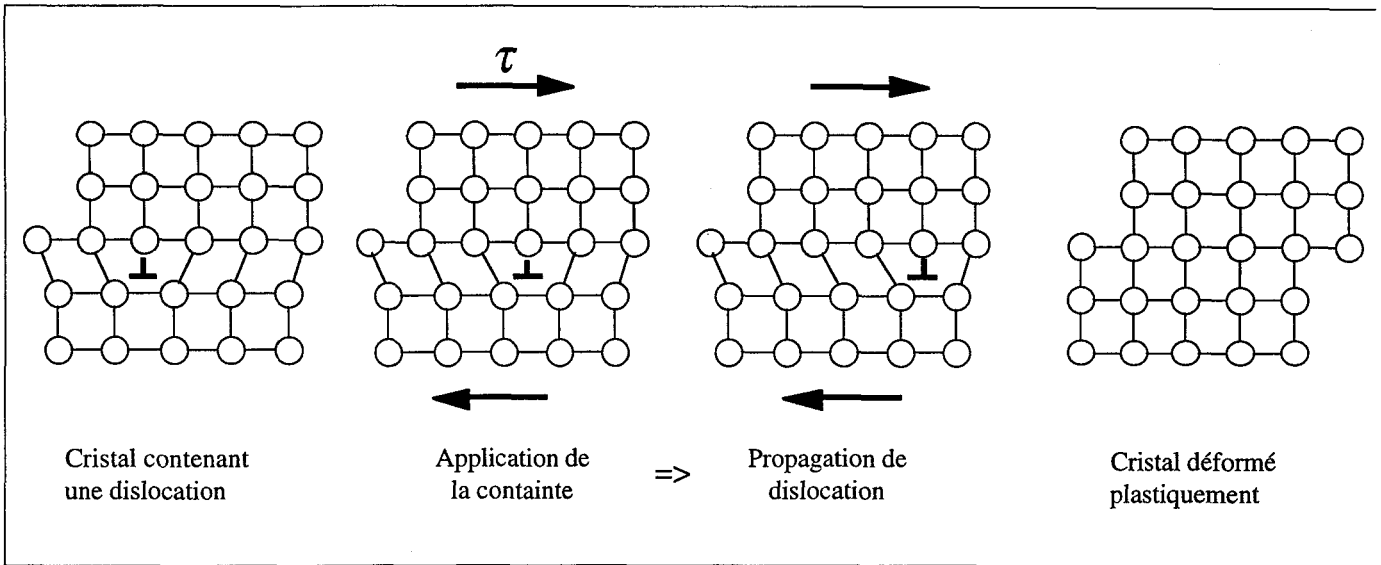


Figure III.1 : Déformation plastique d'un cristal par déplacement d'une dislocation.

III.2.2 - Mécanisme des dislocations

La relation d'Orowan (III.6) permet de déterminer le cisaillement $\dot{\gamma}$ en fonction de la vitesse moyenne \bar{v} des dislocations :

$$\dot{\gamma} = \rho_m b \bar{v} \quad (\text{III.6})$$

où b est le module du vecteur de Burgers des dislocations, et ρ_m la densité de dislocations mobiles. Une ligne de dislocation ne peut se terminer à l'intérieur d'un cristal. Elle doit être fermée ou rejoindre un autre défaut (surface extérieure, joints de grains, autres dislocations, etc.), ce qui a pour conséquence de perturber son déplacement. De plus, elle rencontre d'autres dislocations susceptibles d'arrêter sa progression (formation de verrous). Les dislocations se multiplient lors de la déformation (sources de Frank-Read), elles peuvent aussi s'annihiler mutuellement. La microscopie électronique à transmission révèle qu'elles s'associent pour donner des structures variées sous formes de murs et de cellules, provoquant l'apparition de régions riches en dislocations alternant, plus ou moins régulièrement, avec des régions pauvres en dislocations.

III.2.3 - Comportement phénoménologique du monocristal

Le glissement plastique des plans cristallographiques est la conséquence du déplacement des dislocations. Ce mécanisme commence à partir du moment où la cission appliquée sur le plan atteint un seuil critique dépendant de la densité de dislocations qui évolue avec la déformation plastique, et caractérise le phénomène d'écrouissage. La théorie de Kröner (1958^a) sur les dislocations permet d'effectuer la transition d'échelle entre les dislocations et le monocristal, mais ne peut, à l'heure actuelle, définir quantitativement le problème de la plasticité des métaux. Ainsi, du fait de la mobilité importante des dislocations sur les plans de glissements, la plasticité est décrite de façon phénoménologique.

On définit sur chaque système de glissement g , le critère phénoménologique de plasticité (III.1), appelé dans ce cas critère de Schmid.

Un système de glissement est entièrement déterminé par une normale \vec{n} et une direction \vec{m} , comme la *figure III.2* le schématise.

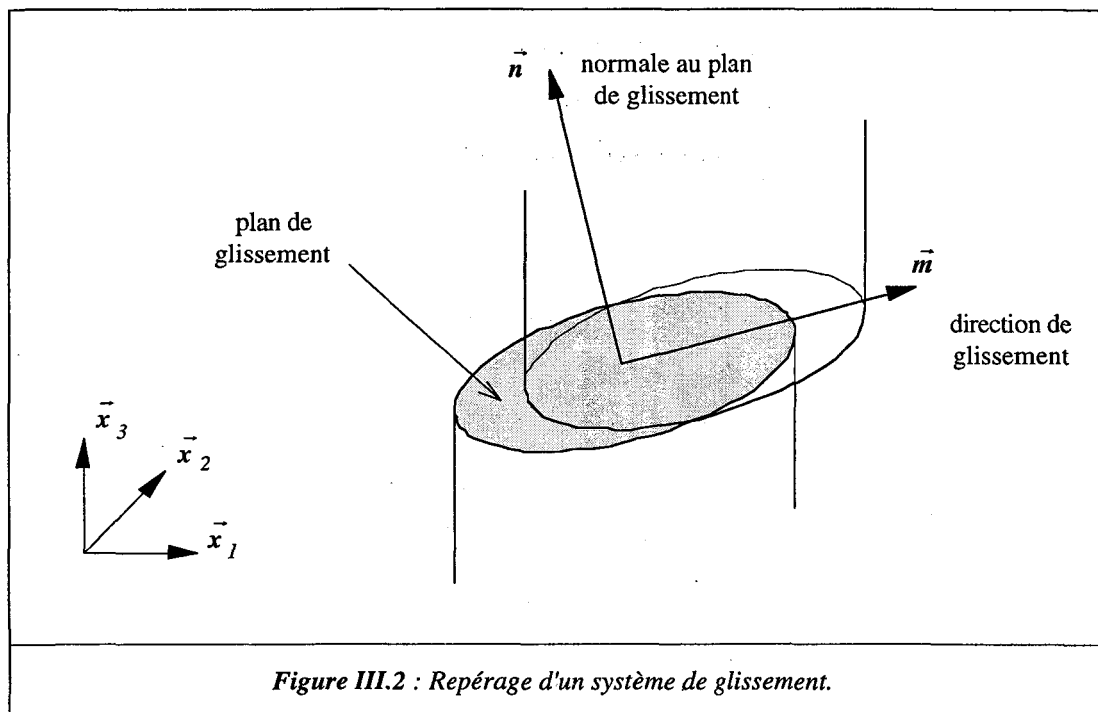


Figure III.2 : Repérage d'un système de glissement.

Sur ce système de glissement g , on introduit le tenseur d'orientation de Schmid, défini par le produit tensoriel :

$$S_{ij}^g = m_i^g n_j^g \quad (\text{III.7})$$

Par conséquent, le tenseur de composantes R_{ij}^g introduit dans (III.1), qui définit la direction de l'écoulement plastique, est obtenu par :

$$R_{ij}^g = \frac{1}{2} (m_i^g n_j^g + m_j^g n_i^g) \quad (\text{III.8})$$

De plus, τ_c^g caractérise la cission critique du système g , sur lequel la projection du tenseur des contraintes de Cauchy σ_{ij} permet de calculer la cission résolue τ^g tel que :

$$\tau^g = R_{ij}^g \sigma_{ij} \quad (\text{III.9})$$

Alors, le système g s'active si les relations (III.1) et (III.3) sont vérifiées, ce qui constitue ici le critère de Schmid et peut s'écrire :

$$\tau^g - \tau_c^g = 0 \quad (\text{III.10})$$

$$\dot{\tau}^g - \dot{\tau}_c^g = 0 \quad (\text{III.11})$$

Dés lors que l'écoulement plastique s'initie, le cristal s'écroutit, et l'évolution des cissions critiques de chaque système est défini par (III.5), qui se met sous la forme suivante :

$$\dot{\tau}_c^g = \sum_h H^{gh} \dot{\gamma}^h \quad (\text{III.12})$$

où $\dot{\gamma}^h$ représente la vitesse de glissements sur les systèmes actifs h . La matrice d'écroutissage H^{gh} permet de traduire phénoménologiquement les mécanismes de mouvement et de stockage des dislocations dans les plans de glissements. Expérimentalement, la forme et l'évolution de H^{gh} ont été étudiées au travers d'écroutissage latent (durcissement croisé de systèmes) qui montrent une forte anisotropie, fonction de la structure cristalline du matériau (Cubique Centré ou Cubique Face Centré), et reliée aux interactions de contacts entre dislocations. Dans la thèse de Muller (1994), on peut trouver l'expression de la matrice d'écroutissage :

$$H^{gh} = h^{(gh)} a^{gh} \quad (\text{III.13})$$

où $h^{(gh)}$ sont les modules dépendants de l'histoire du chargement imposé au matériau, et a^{gh} est la matrice décrivant l'anisotropie des interactions entre les systèmes de glissement. Si a^{gh} est bien défini par les essais d'écroutissage latent, Franciosi et al. (1980), l'évolution des modules $h^{(gh)}$ avec la déformation est un phénomène plus complexe.

Notre travail consistant à étudier la faisabilité d'un couplage du modèle polycristallin proposé avec un code d'éléments finis, il n'est pas justifié, dans un premier temps, de considérer l'évolution des modules d'écrouissage. Par la suite, on peut ne prendre que deux termes constants pour déterminer la matrice d'écrouissage, Franciosi (1983), correspondant à deux types d'interactions :

- ◆ Les interactions faibles, auxquelles on relie le terme H_1 décrivant l'auto-écrouissage. Sa valeur peut être estimée à environ $\mu/250$ (stade II de la courbe $\tau = f(\gamma)$) pour un CFC et $\mu/500$ pour un CC, Lipinski (1993), où μ représente le module de cisaillement du matériau.
- ◆ Les interactions fortes, où le terme H_2 est choisi proportionnel à H_1 ($H_2 = A H_1$). Le coefficient d'anisotropie A décrit l'écrouissage latent du monocristal.

Dans les cas de simulations en grandes transformations, il est indispensable de tenir compte de l'évolution de la matrice d'écrouissage lors de l'écoulement plastique. Pour des chargements cycliques, même si la déformation plastique cumulée est importante, elle reste cependant faible lors d'un cycle. Cela légitime l'utilisation d'une matrice d'écrouissage constante dans les simulations d'essais de fatigue réalisées au chapitre V, à l'aide du code d'éléments finis que nous avons développé, et couplé au modèle micromécanique proposé.

III.2.4 - Loi élastoplastique du monocristal

Le problème du comportement élastoplastique du monocristal a été résolu par Hill & Rice (1972), qui supposent que le glissement cristallographique est le seul mécanisme de déformation inélastique, représenté sur la *figure III.3*.

La vitesse de glissement dans la direction \vec{m} d'un point x du plan s'exprime par :

$$\dot{u}_i = \dot{\gamma} (x_j n_j) m_i \quad (\text{III.14})$$

En dérivant par rapport à x_j :

$$\dot{u}_{i,j} = \dot{\gamma} m_i n_j \quad (\text{III.15})$$

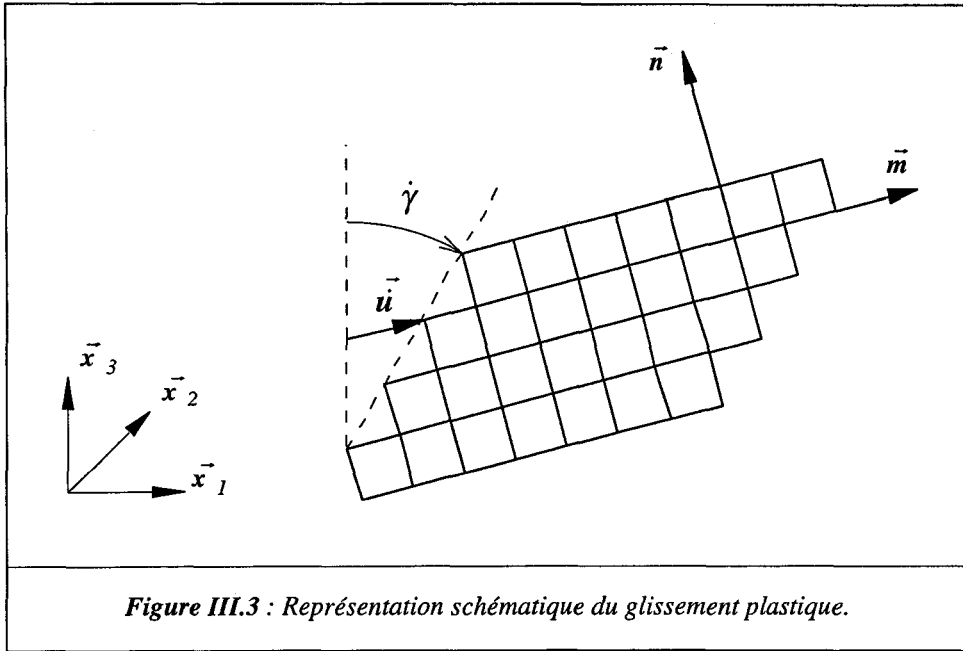


Figure III.3 : Représentation schématique du glissement plastique.

La partie symétrique de $\dot{u}_{i,j}$ nous donne la vitesse de déformation plastique :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \frac{1}{2} (m_i n_j + m_j n_i) \dot{\gamma} \quad (\text{III.16})$$

et la partie antisymétrique donne la vitesse de rotation plastique :

$$\dot{\omega}_{ij}^p = \frac{1}{2} (m_i n_j - m_j n_i) \dot{\gamma} \quad (\text{III.17})$$

L'expression de la déformation plastique exprime la règle d'écoulement plastique associée (III.2), où l'on retrouve la partie symétrique du tenseur de Schmid, définie par (III.8). Quant à la partie antisymétrique, elle intervient dans la rotation plastique, et s'exprime :

$$Q_{ij} = \frac{1}{2} (m_i n_j - m_j n_i) \quad (\text{III.18})$$

Si l'on suppose que l'on a glissement multiple homogène, alors les équations (III.16) et (III.17) peuvent se réécrire :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum_g R_{ij}^g \dot{\gamma}^g \quad (\text{III.19})$$

$$\dot{\omega}_{ij}^p = \sum_g Q_{ij}^g \dot{\gamma}^g \quad (\text{III.20})$$

On considère maintenant le taux de contrainte $\dot{\sigma}_{ij}$, qui peut être relié à la vitesse de déformation élastique par la loi de Hooke :

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^e \quad (\text{III.21})$$

où C_{ijkl} sont les constantes élastiques du monocristal et $\dot{\epsilon}_{kl}^e$ la partie élastique de la vitesse de déformation totale, telle que :

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{kl}^e + \dot{\epsilon}_{kl}^p \quad (\text{III.22})$$

En insérant (III.22) puis (III.19) dans (III.21), on obtient :

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} \left(\dot{\epsilon}_{kl} - \sum_g R_{kl}^g \dot{\gamma}^g \right) \quad (\text{III.23})$$

Les systèmes g étant actifs, ils vérifient le critère de Schmid défini par (III.11) dans lequel on introduit les relations (III.9) et (III.12), on trouve :

$$R_{ij}^g \dot{\sigma}_{ij} - \sum_h H^{gh} \dot{\gamma}^h = 0 \quad (\text{III.24})$$

En remplaçant le taux de contrainte donné par la relation (III.23), on détermine l'expression de la vitesse de cisaillement :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^h &= \sum_h \mathcal{H}^{-gh} R_{ij}^h C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \\ \text{avec } \mathcal{H}^{gh} &= R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^h + H^{gh} \end{aligned} \quad (\text{III.25})$$

Cette expression est basée sur l'hypothèse que \mathcal{H}^{-gh} existe, ou encore que \mathcal{H}^{gh} est défini positif. Il se pose également le problème de l'unicité de la solution, concernant le choix pour la combinaison de systèmes actifs. Les travaux de Hill & Rice (1972), de Lipinski (1993) ou de Petryk (1997), soulignent l'importance de la structure de la matrice d'écrouissage, notamment au niveau de la symétrie. Aujourd'hui, il est connu que l'unicité du choix des mécanismes de déformation dépend du type de chargement appliqué sur le volume élémentaire. La démonstration de l'unicité de la solution peut être trouvée dans la thèse de Lipinski (1993). La sélection de la combinaison des systèmes actifs nécessite alors d'effectuer de nombreux tests parmi tous les systèmes potentiellement actifs, et

engendre un temps de calcul consommé important. Dans le chapitre IV, nous proposons un nouvel algorithme de sélection, basé sur les travaux de Leffers (1968) et Wierzbowski et *al.* (1992), permettant de réduire de façon notable les temps de calculs.

La loi de comportement élastoplastique du monocristal est finalement obtenue en reportant l'expression (III.25) dans (III.23) :

$$\dot{\sigma}_{ij} = l_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} \quad (\text{III.26})$$

où l_{ijkl} représentent les modules élastoplastiques du monocristal définis par :

$$l_{ijkl} = C_{ijkl} - \sum_g \sum_h C_{ijmn} R_{mn}^g \mathcal{H}^{-gh} R_{st}^h C_{stkl} \quad (\text{III.27})$$

Remarque : La logique des calculs ici est similaire à celle effectuée dans le chapitre II, conduisant à la relation élastoplastique définie par les relations (II.31) et (II.32), dont la structure est analogue respectivement aux équations (III.26) et (III.27).

III.3 - Homogénéisation

III.3.1 - Introduction

La loi élastoplastique du monocristal étant clairement définie, il s'agit maintenant d'obtenir le comportement global du matériau. Il faut donc identifier la loi de comportement reliant le taux de contrainte macroscopique à la vitesse de déformation macroscopique :

$$\dot{\Sigma}_{ij} = L_{ijkl}^{eff} \dot{E}_{kl} \quad (\text{III.28})$$

où L_{ijkl}^{eff} sont les modules tangents effectifs (macroscopiques), pour lesquels on détermine leurs expressions par l'intermédiaire d'une transition d'échelle suivie d'une homogénéisation.

III.3.2 - Transition d'échelle

La transition d'échelle consiste à relier les grandeurs locales aux grandeurs macroscopiques correspondantes, par localisation :

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = A_{ijkl} \dot{E}_{kl} \quad (\text{III.29})$$

$$\dot{\sigma}_{ij} = B_{ijkl} \dot{\Sigma}_{kl} \quad (\text{III.30})$$

où \mathbf{A} et \mathbf{B} sont les tenseurs de localisation respectivement en déformations et en contraintes. L'existence de tels tenseurs a été démontrée, en élasticité, par Mandel (1964) et Hill (1965^b).

On introduit alors (III.29) dans (III.26), et l'on obtient :

$$\dot{\sigma}_{ij} = l_{ijkl} A_{klmn} \dot{E}_{mn} \quad (\text{III.31})$$

III.3.3 - Homogénéisation

Si un champ de contraintes vérifie l'équation d'équilibre quasi-statique :

$$\dot{\sigma}_{ij,j} = 0 \quad (\text{III.32})$$

et pour tout point appartenant au bord du Volume Élémentaire Représentatif (V.E.R.) considéré, on a :

$$\dot{\sigma}_{ij} n_j = \dot{\Sigma}_{ij} n_j \quad (\text{III.33})$$

alors le champ de contraintes est statiquement admissible. Dans ce cas, on peut montrer que le taux de contrainte macroscopique est relié au taux de contrainte locale par une opération de moyenne volumique :

$$\dot{\Sigma}_{ij} = \bar{\dot{\sigma}}_{ij} = \frac{1}{V} \int_V \dot{\sigma}_{ij}(r) dV \quad (\text{III.34})$$

où V représente le volume du V.E.R.

De manière analogue, un champ de vitesses de déformations est cinématiquement admissible s'il dérive d'un champ de vitesses de déplacements, vérifiant la compatibilité cinématique et les conditions sur les bords :

$$\dot{u}_i^d = \dot{E}_{ij} x_j \quad (\text{III.35})$$

La vitesse de déformation macroscopique est donc déterminée par :

$$\dot{E}_{ij} = \bar{\dot{\epsilon}}_{ij} = \frac{1}{V} \int_v \dot{\epsilon}_{ij}(r) dV \quad (\text{III.36})$$

En appliquant les opérations de moyenne volumique à la relation (III.31), et en identifiant avec l'équation (III.28), on détermine le tenseur des modules tangents effectifs :

$$L_{ijkl}^{eff} = \overline{l_{ijmn}(r) A_{mnkl}(r)} \quad (\text{III.37})$$

Afin de connaître les propriétés effectives du matériau, il reste donc à identifier le tenseur de localisation A . La détermination de ce tenseur se fait par l'intermédiaire d'une équation intégrale reliant la vitesse de déformation locale du milieu hétérogène aux conditions imposées à la surface extérieure du solide.

III.4 - Equation intégrale cinématique

La détermination des tenseurs de localisation pour un matériau hétérogène conduit à la résolution d'un problème de structure, c'est à dire trouver une solution satisfaisant les équations du problème ; équations d'équilibre, de compatibilité, de comportement, ainsi que les conditions aux limites.

Dederichs & Zeller (1973) ont établi une équation intégrale dans le cadre d'un problème élastique. En élastoplasticité, Berveiller & Zaoui (1979) ont formulé une équation intégrale en petites déformations et Lipinski (1993) en grandes déformations.

On introduit la loi de comportement locale (III.26) dans l'équation d'équilibre (III.32), on a alors en tout point r :

$$\left(l_{ijkl}(r) \dot{\epsilon}_{kl}(r) \right)_{,j} = 0 \quad (\text{III.38})$$

La relation de compatibilité du champ de déformation étant :

$$\dot{\epsilon}_{ij}(r) = \frac{1}{2} \left(\dot{u}_{i,j}(r) + \dot{u}_{j,i}(r) \right) \quad (\text{III.39})$$

l'équation (III.38) devient :

$$\left(l_{ijkl}(r) \dot{u}_{k,l}(r) \right)_{,j} = 0 \quad (\text{III.40})$$

On introduit maintenant un milieu fictif homogène de référence, de modules tangents élastoplastiques L_{ijkl}^0 uniformes, tel que :

$$l_{ijkl}(r) = L_{ijkl}^0 + \delta l_{ijkl}(r) \quad (\text{III.41})$$

La relation (III.40) devient alors :

$$L_{ijkl}^0 \dot{u}_{k,lj}(r) + \left(\delta l_{ijkl}(r) \dot{u}_{k,l}(r) \right)_{,j} = 0 \quad (\text{III.42})$$

De plus, la vitesse $\dot{u}_m(r)$ pour tout point r appartenant au volume V peut s'écrire :

$$\dot{u}_m(r) = \int_V \delta_{jm} \delta(r-r') \dot{u}_j(r') dV' \quad (\text{III.43})$$

où δ_{jm} désigne le symbole de Kronecker et $\delta(r-r')$ la distribution de Dirac.

On introduit maintenant le tenseur de Green $G_{km}(r)$, défini par les relations :

$$L_{ijkl}^0 G_{km,li}(r-r') + \delta_{jm} \delta(r-r') = 0 \quad (\text{III.44})$$

$$\lim_{(r-r') \rightarrow \infty} G_{km}(r-r') = 0 \quad (\text{III.45})$$

Le tenseur de Green caractérise le déplacement au point r dans la direction k provoqué par l'application au point r' du milieu infini L^0 d'une force unité $\delta_{jm} \delta(r-r')$ s'exerçant dans la direction m . L'équation (III.43) peut alors se réécrire :

$$\dot{u}_m(r) = - \int_V L_{ijkl}^0 G_{km,li}(r-r') \dot{u}_j(r') dV' \quad (\text{III.46})$$

Par ailleurs, on a les relations suivantes :

$$G_{km,li}(r-r') \dot{u}_j(r') = \left(G_{km,l}(r-r') \dot{u}_j(r') \right)_{,i} - G_{km,l}(r-r') \dot{u}_{j,i}(r') \quad (\text{III.47})$$

$$G_{km,l}(r-r') \dot{u}_{j,i}(r') = \left(G_{km}(r-r') \dot{u}_{j,i}(r') \right)_{,l} - G_{km}(r-r') \dot{u}_{j,il}(r') \quad (\text{III.48})$$

Ces relations sont maintenant introduites dans l'équation (III.46), qui se réécrit, en utilisant le théorème de la divergence :

$$\begin{aligned} \dot{u}_m(r) = & - \int_S L_{ijkl}^0 G_{km,l}(r-r') \dot{u}_j(r') n_i dS' + \int_S L_{ijkl}^0 G_{km}(r-r') \dot{u}_{j,i}(r') n_l dS' \\ & - \int_V L_{ijkl}^0 G_{km}(r-r') \dot{u}_{j,il}(r') dV' \end{aligned} \quad (\text{III.49})$$

De part les conditions à l'infini imposées au tenseur de Green, la deuxième intégrale de surface est nulle. En outre, la première intégrale représente le champ de vitesse dans un solide homogène ayant la même géométrie et soumis aux mêmes conditions aux limites que le solide considéré. En notant cette vitesse $\dot{u}_m^0(r)$, on obtient :

$$\dot{u}_m(r) = \dot{u}_m^0(r) - \int_V L_{ijkl}^0 G_{km}(r-r') \dot{u}_{j,il}(r') dV' \quad (\text{III.50})$$

D'autre part, l'équation (III.42) peut se réécrire :

$$L_{ijkl}^0 \dot{u}_{k,lj}(r) + \left(\delta l_{ijkl}(r) \dot{\epsilon}_{kl}(r) \right)_{,j} = 0 \quad (\text{III.51})$$

De plus, on a la relation :

$$\begin{aligned} \left(\delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') \right)_{,j} G_{im}(r-r') = & \left(\delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') G_{im}(r-r') \right)_{,j} \\ & - \delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') G_{im,j}(r-r') \end{aligned} \quad (\text{III.52})$$

En insérant (III.51) puis (III.52) dans (III.50), et en utilisant le théorème de la divergence, ainsi que des conditions à l'infini imposées au tenseur de Green, on obtient :

$$\dot{u}_m(r) = \dot{u}_m^0(r) - \int_V G_{im,j}(r-r') \delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \quad (\text{III.53})$$

Le gradient de vitesse peut être alors déterminé :

$$\dot{u}_{m,n}(r) = \dot{u}_{m,n}^0(r) - \int_V G_{im,jn}(r-r') \delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \quad (\text{III.54})$$

On introduit maintenant les tenseurs de Green modifiés :

$$\Gamma_{mnij}^s(r-r') = -\frac{1}{2} \left(G_{im,jn}(r-r') + G_{in,jm}(r-r') \right) \quad (\text{III.55})$$

$$\Gamma_{mnij}^{as}(r-r') = -\frac{1}{2} \left(G_{im,jn}(r-r') - G_{in,jm}(r-r') \right) \quad (\text{III.56})$$

Les expressions des vitesses de déformation et de rotation sont déduites de l'équation (III.54) par symétrisation et antisymétrisation :

$$\dot{\epsilon}_{mn}(r) = \dot{\epsilon}_{mn}^0(r) + \int_V \Gamma_{mnij}^s(r-r') \delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \quad (\text{III.57})$$

$$\dot{\omega}_{mn}(r) = \dot{\omega}_{mn}^0(r) + \int_V \Gamma_{mnij}^{as}(r-r') \delta l_{ijkl}(r') \dot{\epsilon}_{kl}(r') dV' \quad (\text{III.58})$$

En vue de déterminer les tenseurs de localisation définis précédemment, il s'agit de résoudre les équations intégrales (III.57) et (III.58). L'approche autocohérente a été formulée pour la première fois, dans le cadre de l'élasticité linéaire par Kröner (1958^b), qui a de plus démontré que cela constitue la solution exacte de l'intégrale pour un milieu parfaitement désordonné, Kröner (1980). Une première approche du problème de plasticité a montré que les prévisions obtenues à partir d'une telle formulation correspondent bien aux observations expérimentales, Hihi et al. (1985). Des simulations en petites déformations élastoplastiques ont mis en évidence les avantages du schéma autocohérent pour des chargements radiaux et non monotones, Beradaï et al. (1987).

III.5 - Approximation autocohérente

III.5.1 - Hypothèses

L'approche autocohérente est basée sur la solution du problème d'inclusion d'Eshelby (1957). On suppose que le matériau modélisé est constitué de grains d'orientations cristallographiques différentes (éventuellement de structures cristallographiques différentes dans le cas d'un matériau multiphasé). La forme des inclusions peut être approchée par un ellipsoïde. On suppose également que le comportement est uniforme dans chaque grain, mais bien que les structures cellulaires de dislocations soient incluses de façon homogénéisée dans la matrice H , cela ne permet pas de prendre en compte précisément leurs effets. Pour décrire toute hétérogénéité plastique intragranulaire, l'approche proposée risque d'être insuffisante, et un traitement spécifique avec double transition d'échelle peut s'avérer nécessaire, Lemoine (1995).

Dès lors, on est amené à introduire la notion d'hétérogénéité par morceaux à l'aide de la fonction indicatrice de l'inclusion I représentant un grain du polycristal :

$$\theta^I(r) = \begin{cases} 0 & \forall r \notin V_I \\ 1 & \forall r \in V_I \end{cases} \quad (\text{III.59})$$

où V_I est le volume du grain I .

Ainsi, on a :

$$\dot{\epsilon}_{ij}(r) = \sum_{I=1}^N \dot{\epsilon}_{ij}^I \theta^I(r) \quad (\text{III.60})$$

$$\delta l_{ijkl}(r) = \sum_{I=1}^N (l_{ijkl}^I - L_{ijkl}^0) \theta^I(r) = \sum_{I=1}^N \Delta l_{ijkl}^I \theta^I(r) \quad (\text{III.61})$$

où $\dot{\epsilon}_{ij}^I$ et l_{ijkl}^I sont des valeurs supposées uniformes dans le grain I .

En reportant (III.60) et (III.61) dans l'équation intégrale (III.57), on obtient :

$$\dot{\epsilon}_{mn}(r) = \dot{\epsilon}_{mn}^0 + \int_V \Gamma_{mnij}^s(r-r') \left(\sum_{J=1}^N \Delta l_{ijkl}^J \dot{\epsilon}_{kl}^J \theta^J(r') \right) dV' \quad (\text{III.62})$$

On effectue une opération de moyenne de cette équation sur le volume V_I , ce qui permet de déterminer la vitesse de déformation dans le grain I :

$$\dot{\varepsilon}_{mn}^I = \dot{\varepsilon}_{mn}^0 + \frac{1}{V_I} \int_{V_I} \left[\sum_{J=1}^N \left(\int_{V_J} \Gamma_{mnij}^s (r - r') \Delta l_{ijkl}^J \dot{\varepsilon}_{kl}^J \theta^J (r') dV_J' \right) \right] dV_I \quad (\text{III.63})$$

On introduit maintenant les tenseurs d'interaction définis par :

$$T_{mnij}^{IJ} = \frac{1}{V_I} \int_{V_I} \int_{V_J} \Gamma_{mnij}^s (r - r') dV_J' dV_I \quad (\text{III.64})$$

La relation (III.63) devient alors :

$$\dot{\varepsilon}_{mn}^I = \dot{\varepsilon}_{mn}^0 + \sum_{J=1}^N T_{mnij}^{IJ} \Delta l_{ijkl}^J \dot{\varepsilon}_{kl}^J \quad (\text{III.65})$$

Quand $I = J$, le tenseur particulier T^{II} représente l'interaction entre le grain I et le milieu homogène de référence, alors que pour $I \neq J$, les tenseurs T^{IJ} décrivent les interactions entre les grains I et J . Les expressions de ces tenseurs peuvent être trouvées dans la thèse de Fassi-Fehri (1987) et pour lesquels, dans le chapitre IV, nous proposons une nouvelle méthode d'approximation numérique destinée à l'amélioration de l'algorithme, en terme de rapidité et de précision.

Il est important de remarquer que l'expression (III.65) constitue en fait un système linéaire d'équations, dont le rang est égal au nombre N de grains considérés, et permettant de déterminer les vitesses de déformation $\dot{\varepsilon}^I$ de chaque grain I du polycristal. Réécrivant ce système d'une manière légèrement différente, on a :

$$\dot{\varepsilon}_{mn}^I = \dot{\varepsilon}_{mn}^0 + T_{mnij}^{II} \Delta l_{ijkl}^I \dot{\varepsilon}_{kl}^I + \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N T_{mnij}^{IJ} \Delta l_{ijkl}^J \dot{\varepsilon}_{kl}^J \quad I = 1, 2, \dots, N \quad (\text{III.66})$$

III.5.2 - Approximation autocohérente

L'approche autocohérente consiste à choisir le milieu homogène de référence comme étant le milieu effectif, c'est à dire que l'on a :

$$L_{ijkl}^0 = L_{ijkl}^{eff} \quad (III.67)$$

$$\dot{\epsilon}_{mn}^0 = \dot{E}_{mn} \quad (III.68)$$

En considérant (III.67) et (III.68), et en utilisant l'équation de localisation (III.29), on peut réécrire la relation (III.66) :

$$\dot{\epsilon}_{mn}^I - T_{mnij}^{II} \Delta l_{ijkl}^I \dot{\epsilon}_{kl}^I = \dot{E}_{mn} + \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^N T_{mnij}^{IJ} \Delta l_{ijkl}^J A_{klop}^J \dot{E}_{op} \quad (III.69)$$

En factorisant le premier membre de l'équation (III.69) par la vitesse de déformation locale et le second membre par la vitesse de déformation macroscopique, et en identifiant avec (III.29), on obtient l'expression du tenseur de localisation :

$$A_{mnkl}^I = \left(I_{mnop} - T_{mnij}^{II} \Delta l_{ijop}^I \right)^{-1} \left(I_{opkl} + \sum_{J \neq I} T_{opij}^{IJ} \Delta l_{ijrs}^J A_{rskl}^J \right) \quad (III.70)$$

Le tenseur de localisation étant défini, on peut alors déterminer le tenseur des modules tangents effectifs, en réécrivant la relation (III.37) :

$$L_{ijkl}^{eff} = \frac{1}{V} \int_V \left(\sum_{I=1}^N l_{ijmn}^I A_{mnkl}^I \theta^I(r) \right) dV \quad (III.71)$$

En introduisant la fraction volumique f^I du grain I définie par :

$$f^I = \frac{V_I}{V} \quad (III.72)$$

L'équation (III.71) devient alors :

$$L_{ijkl}^{eff} = \sum_{I=1}^N f^I l_{ijmn}^I A_{mnkl}^I \quad (III.73)$$

La détermination du tenseur L^{eff} des modules tangents passe par la relation (III.73), d'aspect simple mais de caractère doublement implicite. En effet, le tenseur A^I dépend des tenseurs de localisation des autres grains, ainsi que des tenseurs d'interaction T^{II} et T^{IJ} , qui nécessitent la connaissance de L^{eff} . La résolution d'un tel problème s'effectue par itérations et sera présentée dans le chapitre suivant, qui concerne entre autres les algorithmes de calcul. Les équations présentées ici, en particulier l'expression (III.70) du tenseur de localisation A^I , prennent en compte les interactions entre les grains, notamment par l'intermédiaire des tenseurs T^{IJ} . Cette approche multisite permet de modéliser l'effet de la répartition spatiale des hétérogénéités sur les propriétés mécaniques du milieu. Cette texture topologique joue un rôle fondamental pour les matériaux composites, mais paraît moins importante dans le cas de la plasticité des polycristaux à cause de l'écrantage des actions intergranulaire à distance par les joints de grains. Par conséquent, dans le cadre de la plasticité polycristalline, on adopte une approche à un site, pour laquelle on a une expression simplifiée du tenseur de localisation :

$$A_{mnl}^I = \left(I_{mnl} - T_{mnij}^{II} \Delta l_{ijkl}^I \right)^{-I} \quad (III.74)$$

La détermination du tenseur T^{II} , dans le cadre de la plasticité polycristalline, et des tenseurs T^{IJ} , en élasticité linéaire des composites est présentée dans le chapitre suivant.

Les expressions définissant les tenseurs L^{eff} et A^I étant maintenant connues pour un état microstructural donné du polycristal, il faut alors établir l'évolution de la structure interne du matériau.

III.6 - Evolution de la microstructure

Lors de la déformation plastique, la structure interne du matériau se modifie constamment. Les variables qui sont amenées à évoluer sont nombreuses. Le déplacement et le stockage des dislocations (sous forme de cellules) entraînent une évolution de la matrice d'érouissage, déjà examinée précédemment, ainsi que des cissions critiques sur chaque système de glissement. Par ailleurs, l'orientation du réseau cristallographique change au cours de la déformation, et sa distorsion crée des contraintes internes résiduelles. Enfin, la texture morphologique se modifie, c'est à dire que la forme et l'orientation de chaque constituant (monocristal, inclusion) évoluent. Dans le cadre de ce travail, on considère que le glissement cristallographique, multiple et homogène, est le seul mécanisme de

déformation permanente, avec évolution des cissions critiques ainsi que de l'orientation du réseau cristallin.

Si le taux des cissions critiques est déjà définie par la relation (III.12), il s'agit maintenant de spécifier l'évolution des angles d'Euler qui caractérisent l'orientation du réseau cristallin, et ont été introduits par Bunge (1968). L'orientation du réseau cristallin est induite uniquement par la vitesse de rotation élastique $\dot{\omega}^e$, supposée uniforme dans le grain. La vitesse totale de rotation est constituée d'une partie élastique et d'une partie plastique :

$$\dot{\omega}_{ij} = \dot{\omega}_{ij}^e + \dot{\omega}_{ij}^p \quad (\text{III.75})$$

La vitesse de rotation plastique $\dot{\omega}^p$ étant définie par la relation (III.20), et la vitesse de rotation totale $\dot{\omega}$ déterminée par l'approximation autocohérente de l'équation (III.58), on obtient alors l'expression de la vitesse de rotation élastique :

$$\dot{\omega}_{ij}^e = \dot{\omega}_{ij} - \sum_g Q_{ij}^g \dot{\gamma}^g \quad (\text{III.76})$$

L'évolution des angles d'Euler est donnée par les relations usuelles :

$$\begin{cases} \dot{\phi}_1 = \dot{\omega}_{13}^e \frac{\sin \phi_2}{\sin \phi} - \dot{\omega}_{23}^e \frac{\cos \phi_2}{\sin \phi} \\ \dot{\phi} = - \dot{\omega}_{23}^e \cos \phi_2 + \dot{\omega}_{13}^e \sin \phi_2 \\ \dot{\phi}_2 = \cos \phi \left(\dot{\omega}_{13}^e \frac{\cos \phi_1}{\sin \phi} + \dot{\omega}_{23}^e \frac{\sin \phi_1}{\sin \phi} \right) + \dot{\omega}_{21}^e \end{cases} \quad (\text{III.77})$$

Dans le cas des grandes transformations, on est amené à faire évoluer la forme et l'orientation de chaque grain du polycristal au cours de la déformation, dont les lois d'évolution peuvent être trouvées dans la thèse de Lipinski (1993). Ici, nous pouvons considérer que la variation de forme et d'orientation du grain a un rôle relativement faible sur la valeur des résultats, par rapport à l'influence de l'évolution de paramètres comme la cission critique ou l'orientation du réseau cristallographique.

Par conséquent dans le modèle autocohérent que nous développons, nous considérons une matrice d'écroutissage constante, ainsi que les dimensions et l'orientation de chaque monocristal fixes au cours de la déformation. Ces hypothèses sont tout à fait justifiées dans le cas de l'étude du couplage de ce modèle avec un code d'éléments finis, en petites transformations.

cours de la déformation. Ces hypothèses sont tout à fait justifiées dans le cas de l'étude du couplage de ce modèle avec un code d'éléments finis, en petites transformations.

III.7 - Conclusions

La modélisation du comportement élastoplastique macroscopique par une méthode qui permet de prendre en compte l'évolution de la microstructure du matériau constitue un problème très complexe. On a vu, que ce type d'approche, avec transition d'échelle, nécessite d'effectuer quelques simplifications comme, entre autres, l'approximation du grain par un ellipsoïde. L'approche autocohérente constitue un compromis raisonnable entre les méthodes statistiques exactes et les approximations de champs uniformes, Taylor (1938), Lin (1957). De plus, elle permet, non seulement, l'accès aux propriétés effectives du matériau, mais aussi à son état microstructurale, et ceci, à tout instant du chargement.

Toutes les équations nécessaires à la modélisation du comportement élastoplastique ayant été établies, il convient maintenant de préciser les techniques de calculs des tenseurs d'interaction T^I et T^J , pour lesquels un nouvel algorithme de résolution numérique a été mis en place, ainsi que du critère utilisé pour le choix des systèmes actifs.

Références bibliographiques

- Beradaï, C., Berveiller, M., Lipinski, P., (1987), *Int. J. Plasticity*, 3, pp. 143-163.
- Berveiller, M., (1978), Thèse d'Etat, Paris Nord.
- Berveiller, M., Zaoui, A., (1979), *J. Mech. Phys.*, 26, pp. 325-339.
- Berveiller, M., Zaoui, A., (1980), *Colloques internationaux du CNRS*, 319, pp. 119-132.
- Berveiller, M., Zaoui, A., (1984), *J. Eng. Mat. Tech.*, 106, p. 295.
- Budiansky, B., Wu, T., T., (1962), *Proc. 4th US. Nat., Cong. of Applied Mech.*, pp. 1175-1183.
- Bunge, H., J., (1968), *Phys. Stat. Sol.*, 26, pp. 167-172.
- Dederichs, P., H., Zeller, R., (1973), *Zeit. Phys.*, 259, pp. 103-113.
- Eshelby, J., D., (1957), *Proc. Roy. Soc.*, A 241, p. 376.
- Fassi-Fehri, O., (1985), Thèse, Université de Metz.
- Franciosi, P., Berveiller, M., Zaoui, A., (1980), *Acta Metall*, 28, pp. 273-283.
- Franciosi, P., (1983), *Acta Metall*, 31, pp. 1331-1342.
- Franciosi, P., (1984), *Proc. 8th Risø Symposium Denmark*, p. 83-89.
- Hihl, A., Berveiller, M., Zaoui, A., (1985), *J. Méc. Théorique et Appl.*, 4, pp. 201-221.
- Hill, R., (1965^a), *J. Mech. Phys. Solids*, 13, pp. 213-222.
- Hill, R., (1965^b), *J. Mech. Phys. Solids*, 13, pp. 89-101.
- Hill, R., (1966), *J. Mech. Phys. Solids*, 14, pp. 95-102.
- Hill, R., Rice, J., R., (1972), *J. Mech. Phys. Solids*, 20, pp. 404-413.
- Honeff, H., Mecking, H., (1978), *Proc. Icotom 6*, 1, p. 148.
- Hutchinson, J., W., (1964), *J. Mech. Phys. Solids*, 12, pp. 11-21.
- Hutchinson, J., W., (1970), *Proc. Roy. Soc.*, A 319, pp. 247-258.
- Kocks, U., F., Canova, G., R., (1986), *Risø Nat. Lab., Roskilde, Denmark*, 35.
- Kröner, E., (1958^a), *Kontinuums Theorie der Verstzungen und Eigens Pannugen*, Springer Verlag.
- Kröner, E., (1958^b), *Z. Physik*, 151, p. 504.
- Kröner, E., (1961), *Acta Metall.*, 9, pp. 155-165.
- Kröner, E., (1977), *J. Mech. Phys. Solids*, 25, pp. 137-155.
- Kröner, E., (1980), *Colloque G.F.R., Ed. Huet-Zaoui*, pp. 15-40.
- Leffers, T., (1968), *Phys. Stat. Sol.*, 25, p. 337.
- Lemoine, X., (1995), Thèse, Université de Metz.
- Lin, T., H., (1957), *J. Mech. Phys. Solids*, 5, pp. 143-158.

- Lipinski, P., (1993), Thèse d'habilitation, Université de Metz.
- Mandel, J., (1964), Proc 11th Int. Cong. Appl. Mech., Springer, pp. 502-509.
- Mandel, J., (1965), Int. J. Solids Struct., 1, pp. 273-295.
- Muller, D., (1994), Thèse, Université de Metz.
- Orowan, E., (1934), Zeit. Phys., 89, 605, 614, 634.
- Petryk, H., (1997), Proc. IUTAM Symp. Micro- and Macrostructural Aspects of Thermoplasticity, Bochum.
- Polanyi, M., (1934), Ibid., 89, p. 660.
- Reuss, H., Z., (1929), Angew Math. Mech., 2, pp. 49-58.
- Sachs, G., (1928), Zeit. der V.D.I., 72, pp. 739-747.
- Taylor, G., I., (1934), Proc. Roy. Soc., A 145, p. 362.
- Taylor, G., I., (1938), J. Inst. Metals, 62, pp. 307-315.
- Tiem, S., Berveiller, M., Canova, G., (1986), Acta Metall, 34, pp. 2139-2149.
- Van Houtte, P., (1978), Acta Metall, 26, p. 591.
- Voigt, W., (1889), Wied. Ann., 38, pp. 573-587.
- Wierzbowski, K., Jura, J., Haije, W., G., Helmholtz, R., B., (1992), Cryst. Res. Technol., 27, p. 513.
- Willis, J., R., (1964), Q. J. Mech. Appl. Math., 17, pp. 157-164.
- Zaoui, A., (1970), Thèse d'Etat, Paris.

CHAPITRE IV

LOIS DE COMPORTEMENT,

SCHEMAS DE

RESOLUTION NUMERIQUE

ET APPLICATIONS

Dans ce chapitre, on précise le calcul des tenseurs d'interaction T^{II} et T^{IJ} , par l'intermédiaire des transformées de Fourier. On introduit une nouvelle technique de résolution numérique pour la détermination de ces tenseurs. On expose ensuite la procédure itérative mise en place pour établir le tenseur L^{eff} des modules tangents, et C^{eff} dans le cadre de l'élasticité linéaire. Enfin, on présente une méthode de sélection des systèmes actifs, permettant d'éviter un nombre important de combinaisons sur les systèmes potentiellement actifs, à tester. On valide alors le modèle proposé en comparant les résultats issus de calculs avec des résultats obtenus expérimentalement.

IV.1 - Détermination des tenseurs d'interaction

IV.1.1 - Introduction

Le caractère implicite de l'approche autocohérente nous oblige à utiliser une procédure itérative de construction de la solution. A chaque itération, il est nécessaire de recalculer les tenseurs d'interaction, conduisant par là même à une élévation importante des temps de calculs. C'est pourquoi, il est indispensable d'optimiser le calcul de ce tenseur, qui, par la relation (III.64), ne peut être déterminé analytiquement que pour les cas simples d'inclusions sphériques dans un milieu isotrope. Pour toute autre configuration, on doit employer une intégration numérique, en sachant que la précision de l'évaluation de ce tenseur peut être déterminante pour une bonne modélisation du comportement macroscopique.

La mise en place des expressions de T^{II} et T^{IJ} est basée sur les techniques de transformée de Fourier du tenseur de Green. Cette méthode a été proposée par Kneer (1965) et reprise par Mura (1971) pour déterminer le tenseur T^{II} . Fassi-Fehri (1985) a généralisé cette approche au cas du tenseur T^{IJ} pour le problème d'une paire d'inclusions ellipsoïdales dans un milieu anisotrope. Ici, on ne présente pas toutes les étapes de calcul, qui peuvent être trouvées par exemple dans Fassi-Fehri (1985), et partiellement en annexe.

IV.1.2 - Expression analytique des tenseurs d'interaction

La détermination analytique des tenseurs d'interaction ne peut être réalisée que dans le cas d'un milieu isotrope pour des inclusions sphériques. Toutefois, on peut trouver dans la littérature, voir par exemple Mura (1971), des expressions approchées du tenseur T^{II} pour des inclusions dont la géométrie présente une disproportion dimensionnelle marquée, telles que les fibres longues ou les

inclusions de type *penny-shape*. La formulation analytique de ce tenseur pour une inclusion sphérique plongée dans un milieu isotrope, caractérisé par un coefficient de Poisson ν et un module de cisaillement μ , est :

$$T_{klmj}^{II} = \frac{I}{30 \mu (1 - \nu)} \left[\delta_{kl} \delta_{mj} - (4 - 5 \nu) (\delta_{jk} \delta_{mi} + \delta_{km} \delta_{jl}) \right] \quad (\text{IV.1})$$

En ce qui concerne le tenseur T^{IJ} , représentant l'interaction entre deux inclusions, le calcul analytique peut être effectué uniquement pour inclusions sphériques. Soient r_1 et r_2 les rayons respectifs des inclusions désignées par I et J , la distance entre leur centre est notée R , on pose :

$$\rho^2 = \frac{r_1^2 + r_2^2}{R^2} \quad H = \frac{V_J}{16 \pi R^3} \frac{I}{\mu (1 - \nu)} \quad (\text{IV.2})$$

Les composantes non nulles du tenseur sont alors données par :

$$\begin{aligned} \left. \begin{array}{l} T_{1111}^{IJ} \\ T_{2222}^{IJ} \end{array} \right| &= H \left(1 - 4 \nu + \frac{9}{5} \rho^2 \right) \\ T_{3333}^{IJ} &= H \left(-8 + 8 \nu + \frac{24}{5} \rho^2 \right) & \left. \begin{array}{l} T_{1212}^{IJ} \\ T_{1221}^{IJ} \end{array} \right| &= H \left(1 - 2 \nu + \frac{3}{5} \rho^2 \right) \\ \left. \begin{array}{l} T_{1122}^{IJ} \\ T_{2211}^{IJ} \end{array} \right| &= H \left(-1 + \frac{3}{5} \rho^2 \right) & \left. \begin{array}{l} T_{1313}^{IJ} \\ T_{2323}^{IJ} \end{array} \right| &= H \left(-2 + 4 \nu - \frac{12}{5} \rho^2 \right) \\ \left. \begin{array}{l} T_{1133}^{IJ} = T_{3311}^{IJ} \\ T_{2233}^{IJ} = T_{3322}^{IJ} \end{array} \right| &= H \left(2 - \frac{12}{5} \rho^2 \right) & \left. \begin{array}{l} T_{1331}^{IJ} \\ T_{2332}^{IJ} \end{array} \right| &= H \left(4 - 2 \nu - \frac{12}{5} \rho^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{IV.3})$$

Pour toutes autres configurations, la détermination des tenseurs T^{II} et T^{IJ} doit se faire par une procédure d'approximation numérique, dont l'efficacité s'exprime non seulement en terme de précision des résultats, mais aussi en terme de vitesse d'exécution algorithmique.

IV.1.3 - Approximation numérique des tenseurs d'interaction

La détermination des tenseurs T^{II} et T^{IJ} se ramène à un calcul d'intégrales doubles (voir annexe), pour lesquelles il n'existe pas de solutions analytiques, à l'exception des cas particuliers cités plus haut. Par conséquent, il s'avère nécessaire d'utiliser une approche numérique. Dans le cas d'intégrales simples, la résolution numérique est généralement facile à mettre en place, avec une bonne approximation de la solution exacte pour les nombreuses méthodes existantes (méthode des rectangles, de Simpson, de Gauss, ...). En ce qui concerne l'approximation numérique des intégrales doubles, les méthodes habituelles convergent difficilement vers la solution, et la résolution devient problématique. Dans sa thèse, Lipinski (1993) a mis au point un algorithme basé sur la méthode d'intégration de Gauss (classique pour l'évaluation numérique d'intégrales simples), dans lequel l'intégrale d'une fonction $f(\theta, \varphi)$, pour $-1 \leq \theta, \varphi \leq +1$, est approchée par une double somme :

$$I = \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} f(\theta, \varphi) d\theta d\varphi = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M f(\theta_i, \varphi_j) w_i w_j \quad (IV.4)$$

où :

N et M sont les nombres de points d'intégration respectifs selon θ et φ

θ_i et φ_j sont les positions des points d'intégration

w_i et w_j sont les poids d'intégration

Les valeurs des poids ainsi que les positions des points d'intégration sont tabulées, voir par exemple Ralston (1965). Si les bornes d'intégration sont différentes de ± 1 , un changement de variables approprié permet de ramener le calcul au cas précédemment décrit.

Si cette méthode fournit généralement de très bons résultats avec une convergence rapide des calculs, où quelques points d'intégration suffisent, on peut améliorer cette technique en ce qui concerne notre problème d'approximation numérique des tenseurs d'interaction. En effet, on remarque (voir annexe) que les tenseurs T^{II} et T^{IJ} sont définis par l'intégration de fonctions trigonométriques, relatives à θ et φ . En s'inspirant des travaux réalisés par Carmasol & Lipinski (1995), on propose un algorithme basé sur le développement en polynômes trigonométriques des fonctions à intégrer, qui peuvent, en raison de leur périodicité, être approchées par une série de Fourier tronquée. Par exemple pour une fonction à une variable $f(\theta)$ périodique, cette série de Fourier s'écrit de manière générale :

$$f(\theta) \approx \frac{a_0}{\sqrt{2}} + \sum_{k=1}^n (a_k \cos k\theta + b_k \sin k\theta) \quad (IV.5)$$

En généralisant ce raisonnement au cas d'une fonction à deux variables, on montre que l'approximation de l'intégrale de la fonction $f(\theta, \varphi)$ est donnée par :

$$\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} f(\theta, \varphi) d\varphi d\theta = \frac{2\pi^2}{NM} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M f(\theta_i, \varphi_j) \quad (\text{IV.6})$$

$$\theta_i = \frac{\pi}{N} (i-1) \quad \varphi_j = \frac{2\pi}{M} (j-1) \quad (\text{IV.7})$$

Dans l'équation (IV.6), analogue à la relation (IV.4), on remarque que les poids d'intégration ne sont plus utilisés. Le problème de leur tabulation est donc résolu, de même pour les points d'intégration, dont les valeurs sont obtenues par (IV.7).

Il s'agit à présent de valider ce nouvel algorithme par une campagne d'essais numériques, que l'on peut retrouver dans Zattarin *et al.* (1997^a). On compare, en outre, les résultats obtenus à ceux issus de la méthode d'intégration de Gauss précédemment citée.

IV.1.4 - Résultats

On effectue la comparaison entre les deux algorithmes présentés sur deux points spécifiques, caractérisant leur efficacité relative. Dans un premier temps, on évalue leur aptitude à approcher la valeur exacte de l'intégrale avec un nombre de points d'intégration limités, puis on compare le temps de calcul respectif, nécessaire à leur exécution. Le critère adopté afin de déterminer l'erreur d'approximation numérique est basé sur le calcul de la norme des tenseurs. Pour cela on se place dans des cas où l'on connaît l'expression analytique de T^H et T^{IJ} , alors l'erreur en %, liée à l'emploi de l'algorithme est donnée par :

$$\text{Erreur} = 100 \frac{\|T_{alg.}\| - \|T_{ana.}\|}{\|T_{ana.}\|} \quad (\text{IV.8})$$

La figure IV.1 présente les erreurs commises, par les algorithmes, sur l'évaluation du tenseur T^H (en terme de norme), concernant différentes géométries d'inclusions plongées dans un milieu isotrope. Il est à noter que le nombre de points d'intégration indiqué correspond au nombre de points utilisés pour chacune des deux variables d'intégration θ et φ . On remarque que dans les cas d'inclusions sphériques ou de fibres longues, les algorithmes évaluent le tenseur avec pratiquement la même précision, et qu'il suffit de quelques points d'intégration pour parvenir à une très faible erreur d'approximation, notamment pour les sphères. L'évaluation de T^H d'une inclusion de type penny-

shape est plus délicate, et exige un nombre de points d'intégrations plus élevé. On observe alors que l'algorithme proposé, à un nombre fixé de points, permet d'obtenir une erreur d'approximation plus faible.

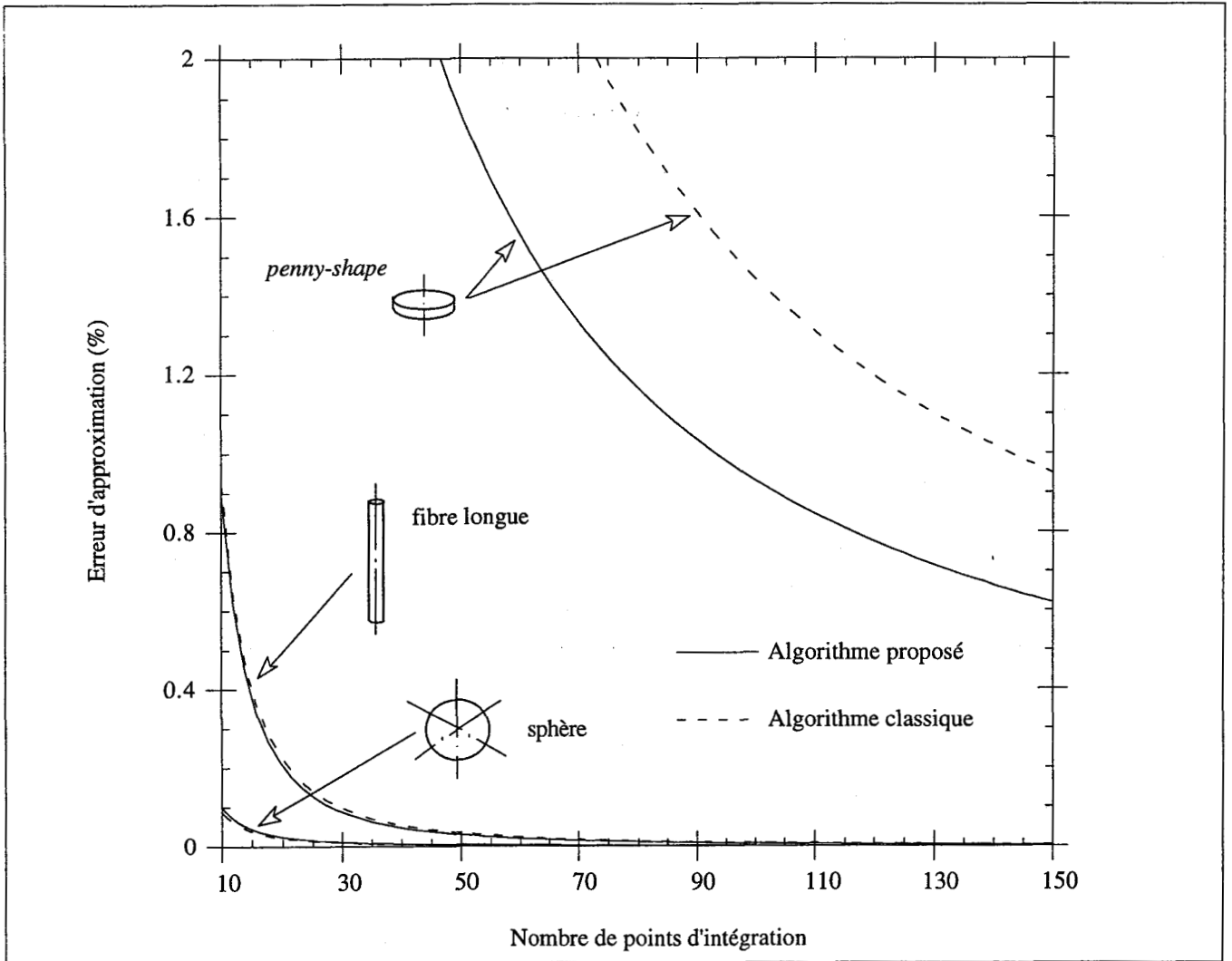


Figure IV.1 : Approximation de T^{II} pour différentes inclusions dans un milieu isotrope.

La figure IV.2 représente l'erreur dû à l'évaluation numérique du tenseur T^{II} , pour lequel il existe une expression analytique uniquement pour des inclusions sphériques. L'utilisation de l'algorithme proposé permet alors d'obtenir une précision plus grande sur les résultats, par rapport à la méthode d'intégration classique de Gauss.

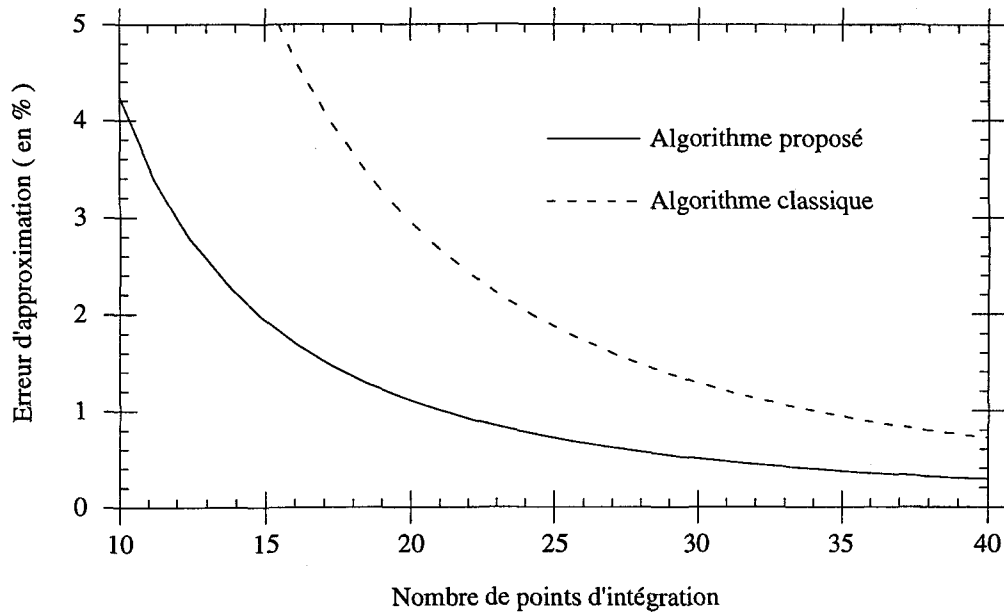


Figure IV.2 : approximation de T^{II} pour des inclusions sphériques dans un milieu isotrope.

D'une manière générale, en utilisant l'algorithme proposé, nous pouvons diminuer le nombre de points d'intégration par rapport à une approche classique tout en ayant une erreur d'approximation identique, ce qui permet de réduire le temps de calcul. De plus, nous avons constaté que pour un même nombre de points d'intégration, la vitesse d'exécution de l'algorithme proposé est supérieure à celle de la méthode de Gauss. La figure IV.3 reprend les courbes décrivant l'erreur commise sur le tenseur T^{II} , sur laquelle on a ajouté le temps de calcul nécessaire au déroulement de chaque algorithme. Ce temps est un temps relatif entre les deux algorithmes, puisqu'en absolu il dépend de l'ordinateur utilisé, ici une station de travail HP 735. On constate sur la figure, que si l'on s'impose une erreur maximale d'approximation de 1% sur le tenseur, on constate alors que l'utilisation de l'algorithme proposé consomme environ trois fois moins de temps par rapport à l'approche classique.

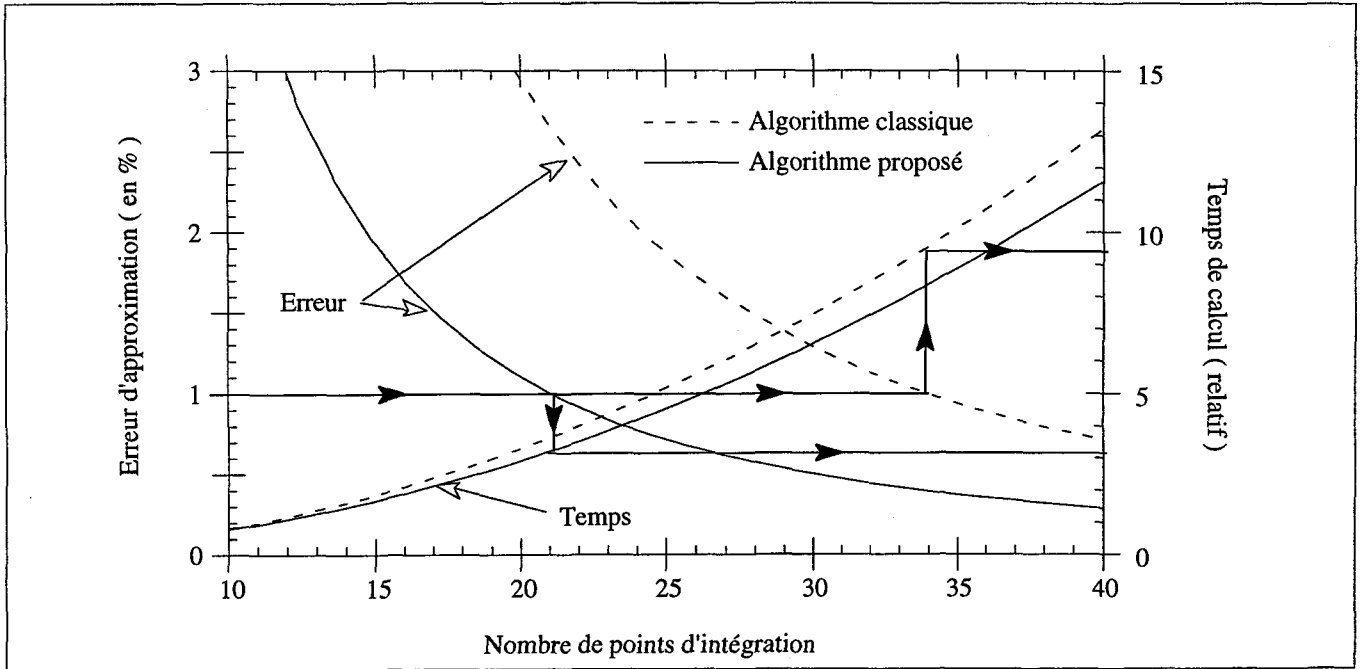


Figure IV.3: approximation de T^{II} et temps de calcul.

IV.1.5 - Conclusions

Dans le chapitre III, nous avons vu que la connaissance des tenseurs d'interaction T^{II} et T^{IJ} permet de déterminer le tenseur de localisation A^I défini par l'équation (III.74) dans le cadre d'une modélisation à un site, et (III.70) pour une modélisation à sites multiples. Le caractère implicite de l'approche autocohérente nous conduit à résoudre le système d'équations (III.66) par une méthode itérative. Ce procédé nécessite d'évaluer numériquement les tenseurs d'interaction à chaque itération. La méthode d'intégration numérique que nous avons développée permet, par rapport à un algorithme classique, de réduire considérablement les temps de calcul des tenseurs T^{II} et T^{IJ} . Le gain de temps total ainsi obtenu trouve tout son intérêt lors du couplage de l'approche autocohérente avec la méthode des éléments finis, qui, comme nous le verrons dans le chapitre V, nécessite de connaître à chaque état d'équilibre la loi de comportement en de nombreux points de la structure.

IV.2 - Détermination des modules tangents macroscopiques

Il s'agit, dans ce paragraphe, de mettre en œuvre un algorithme permettant de contourner le caractère implicite de la méthode autocohérente. Nous proposons alors une approche itérative de la solution, qui consiste à choisir comme milieu de référence, pour un pas de calcul, celui calculé au pas précédent. Dans un premier temps, on applique cette méthode itérative pour déterminer le comportement élastique du matériau microhétérogène.

IV.2.1 - Détermination des constantes élastiques globales.

Le modèle théorique développé au chapitre III permet d'approcher le comportement élastique du matériau, à partir de la connaissance du comportement local des constituants, ainsi que des textures cristallographiques, morphologiques et topologiques. La procédure incrémentale, requise pour résoudre les équations implicites (III.73) et (III.74) ou (III.70), requiert une approximation initiale des constantes élastiques C^{eff} , et du tenseur de localisation A^I lors d'une modélisation à sites multiples. La première approche est obtenue à partir du modèle de Voigt, pour lequel on a :

$$C_0 = C^V = \sum_{I=1}^N f^I c^I \quad (IV.9)$$

où c^I représente le tenseur des constantes élastiques du constituant I , et f^I sa fraction volumique. Si la modélisation est à sites multiples, le tenseur de localisation A^I au démarrage du calcul est pris égal au tenseur unité. Les conditions initiales ainsi définies, il s'agit d'approcher C^{eff} pour lequel l'organigramme de résolution est présenté sur la *figure IV.4*, et commenté ci-dessous :

- ⇒ Les tenseurs T_{i+1}^{II} (et T_{i+1}^{II} pour une modélisation à sites multiples) sont déterminés à partir des constantes élastiques de l'itération " i ", que l'on prend comme milieu de référence.
- ⇒ Calcul du terme Δc_{i+1}^I par rapport au milieu de référence.
- ⇒ Calcul des tenseurs de localisation A_{i+1}^I , exprimé ici pour une approche à sites multiples. Dans le cadre d'une modélisation à un site, il convient de remplacer cette relation par (III.74).
- ⇒ Détermination des propriétés élastiques C_{i+1} , en utilisant la relation (III.73) appliquée au cas de l'élasticité.

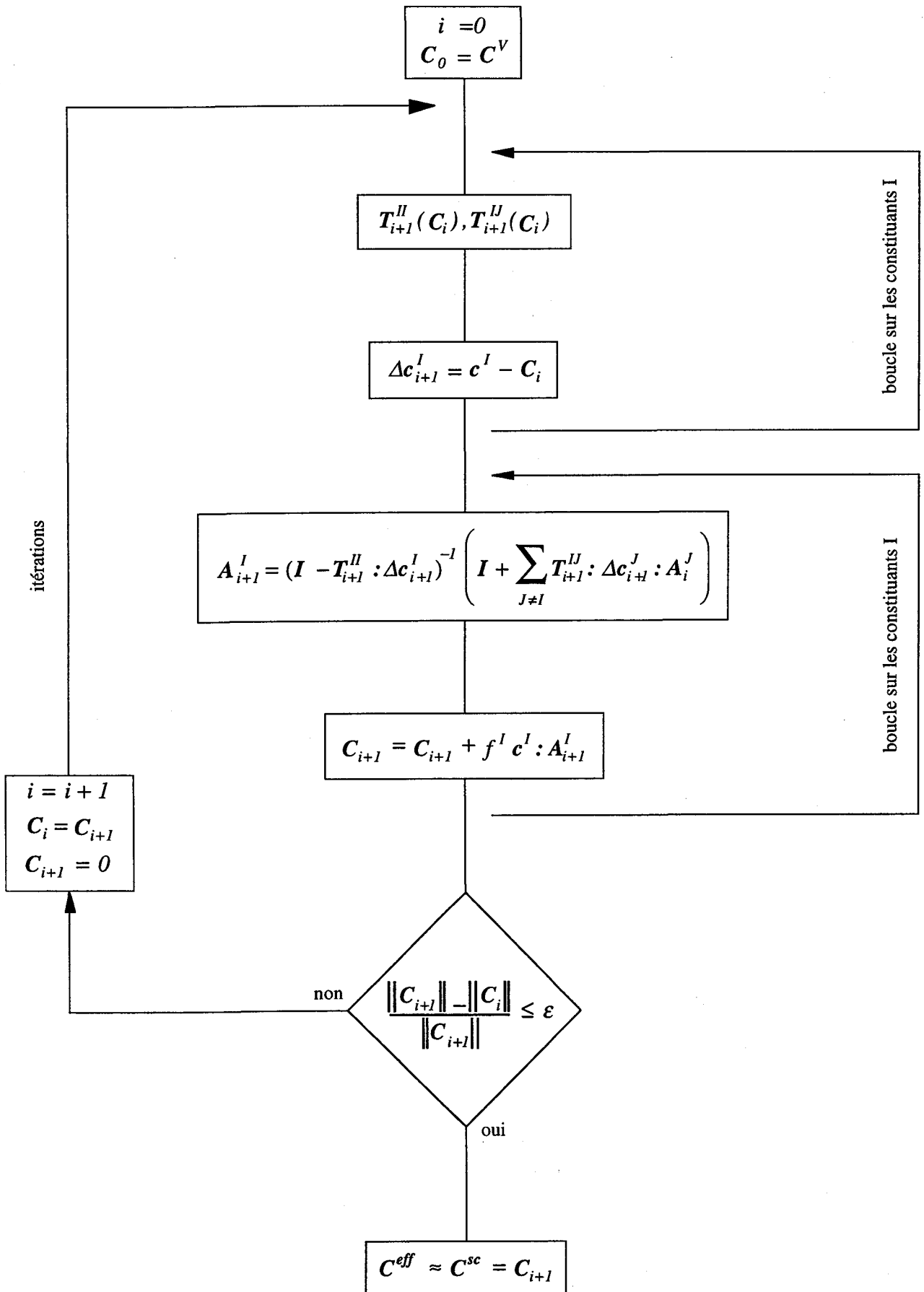


Figure IV.4 : Algorithme de la méthode autocohérente à sites multiples en élasticité.

⇒ Vérification de la convergence de la solution, où l'on adopte ici un critère basé sur la comparaison des normes du tenseur des constantes élastiques dans deux itérations successives. On arrête le processus au moment où :

$$\frac{\|C_{i+1}\| - \|C_i\|}{\|C_{i+1}\|} \leq \varepsilon \quad (\text{IV.10})$$

où ε représente une tolérance admise.

⇒ Lorsque le critère de convergence est atteint, l'approximation du tenseur C^{eff} est alors donnée par C^{sc} issu de la méthode autocohérente présentée.

Cette méthode permet d'obtenir une précision de $\varepsilon = 10^{-4}$ en quelques itérations, dépendant de l'hétérogénéité du matériau. On valide maintenant le modèle présenté en comparant les résultats obtenus avec ceux issus d'autres méthodes, notamment Begis *et al.* (1983), Sangani & Lu (1987), Brockenbrough *et al.* (1992), Rodin (1993).

Les premiers essais comparatifs sont réalisés pour des inclusions sphériques vides situées dans une matrice élastique isotrope, notée M . La *figure IV.5* représente l'évolution du module de cisaillement effectif ($\mu_{12}^{eff} = \mu_{13}^{eff} = \mu_{23}^{eff} = \mu^{eff}$) en fonction de la fraction volumique de vides sphériques, positionnés selon plusieurs types de réseaux; Cubique Simple, Cubique Centré et Cubique Face Centrée. Si pour de faibles fractions volumiques, l'ensemble des modèles fournissent des résultats identiques, on note une divergence lorsque le pourcentage de vide augmente. L'approche autocohérente atteint ici sa limite de validité, étant donné qu'elle est conçue, à l'origine, pour des matériaux parfaitement désordonnés. Par la suite, on propose une modification du modèle afin de pouvoir résoudre un tel problème. Cette divergence se retrouve sur la *figure IV.6* représentant l'évolution du coefficient d'anisotropie A défini par :

$$A = \frac{2 C_{1212}^{eff}}{C_{1111}^{eff} - C_{1122}^{eff}} \quad (\text{IV.11})$$

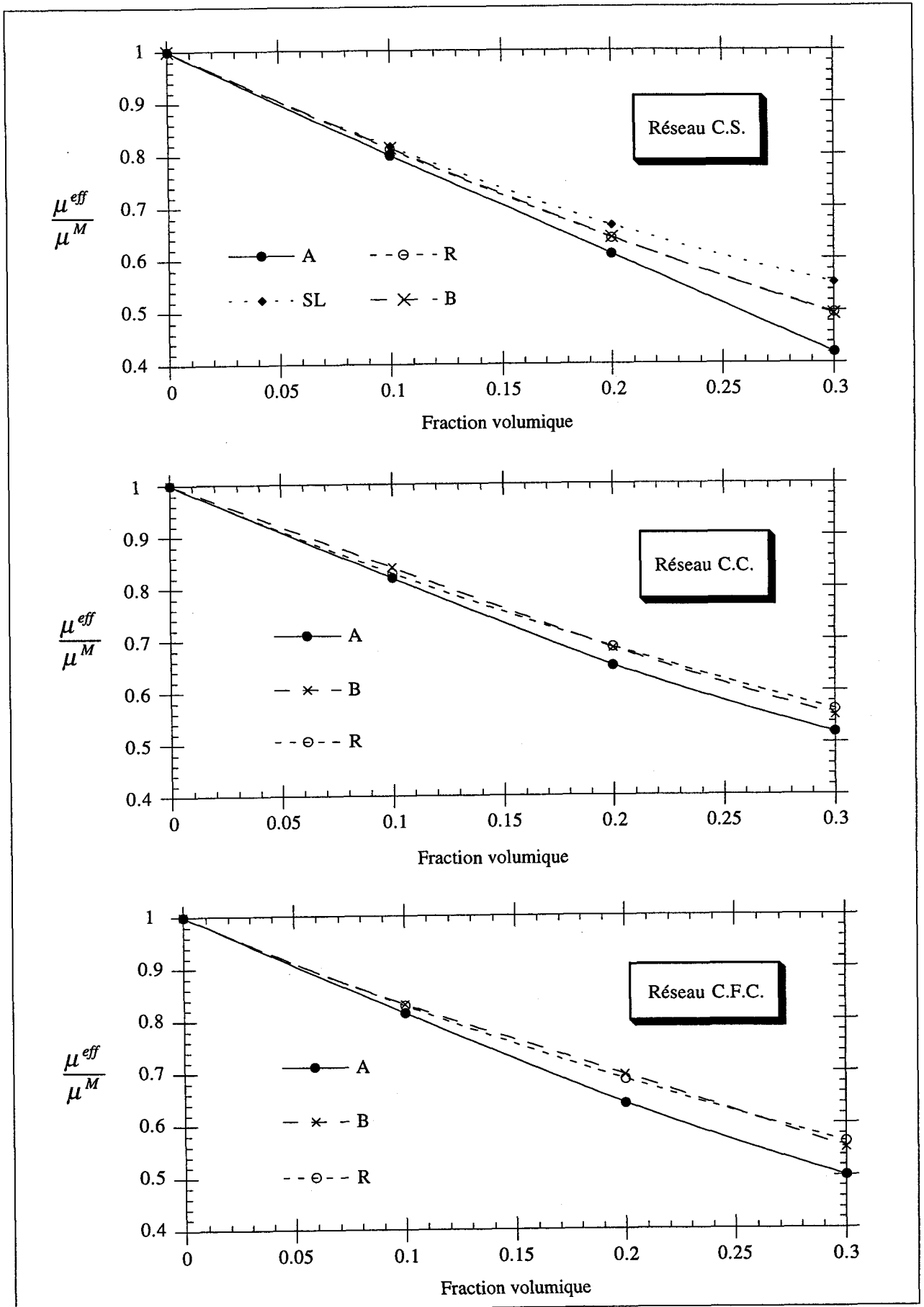


Figure IV.5 : Evolution du module de cisaillement, en fonction de la fraction volumique de vides sphériques, situés selon un réseau cubique, pour différentes méthodes : (A) Autocoherent, (R) Rodin, (SL) Sangani & Lu, (B) Brockenbrough et al.

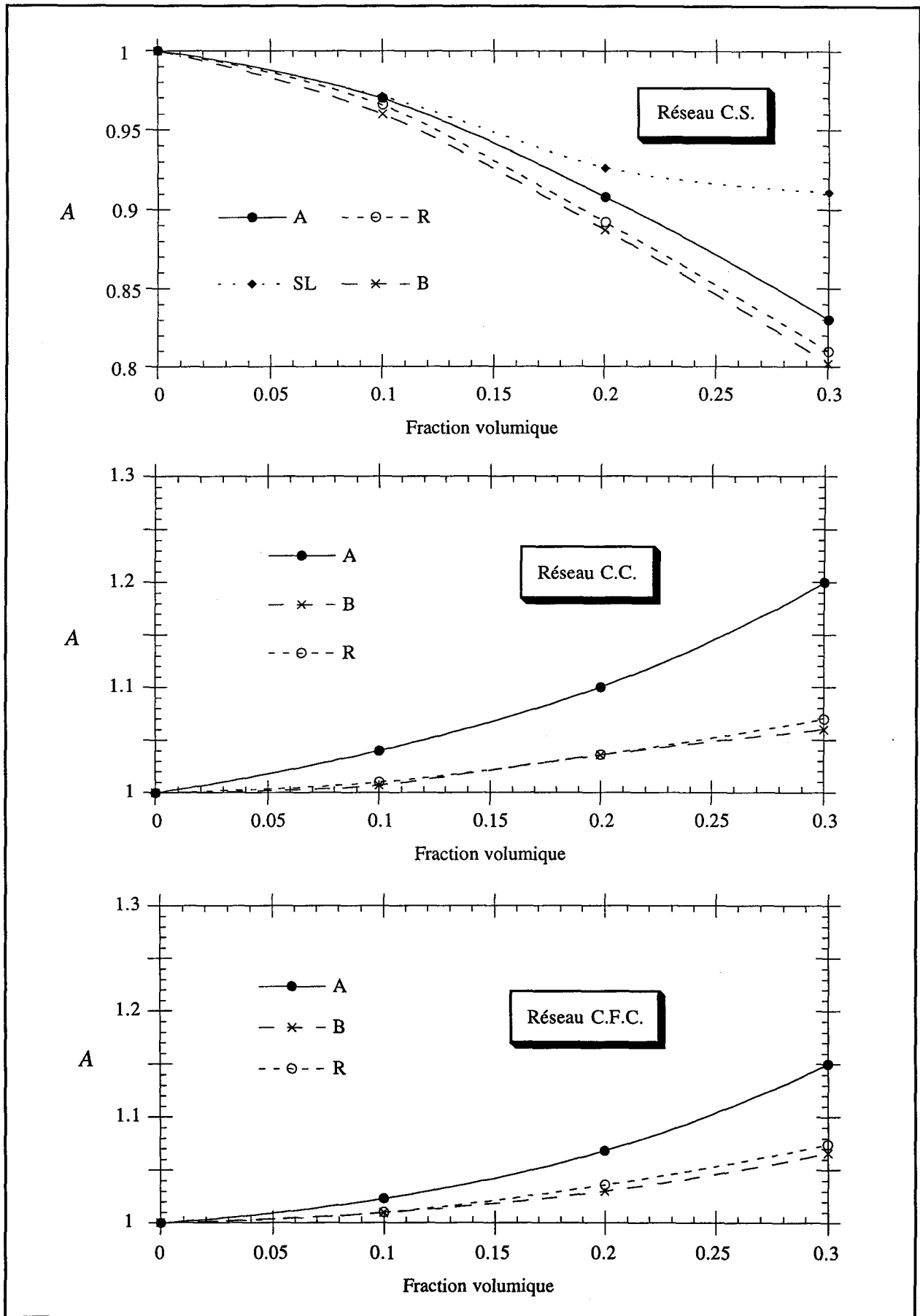


Figure IV.6 : Evolution du coefficient d'anisotropie, en fonction de la fraction volumique de vides sphériques, situés selon un réseau cubique, pour différentes méthodes : (A) Autocoherent, (R) Rodin, (SL) Sangani & Lu, (B) Brockenbrough et al.

On étudie maintenant un matériau contenant des inclusions élastiques, dont les différentes textures topologiques correspondent à celles du cas précédent. Sur la *figure IV.7*, on retrouve une comparaison du module effectif obtenu à partir des différents modèles. Les calculs sont effectués pour différentes rigidités d'inclusions, caractérisées par le rapport de leur module de cisaillement avec celui de la matrice. Si ce rapport est relativement faible (≈ 5), on constate que le modèle proposé permet d'obtenir des résultats similaires à ceux trouvés dans la littérature, et ce pour les trois textures topologiques considérées. Dans le cas d'un rapport plus important (≥ 40), on note une divergence des résultats obtenus par les différentes méthodes. De nouveau, cette divergence est d'autant plus grande que la fraction volumique des inclusions est importante.

La dernière étude réalisée dans le cadre de l'élasticité linéaire concerne l'approximation des composantes effectives d'un composite constitué d'une résine isotrope dans laquelle sont placées des fibres longues parallèles. Ces fibres ont un arrangement périodique, ce qui conduit à un comportement orthotrope du matériau. Ce composite a été étudié par Begis et *al.* (1983), qui ont utilisé un code d'éléments finis adapté au problème d'homogénéisation des propriétés élastiques des matériaux. Contrairement à un schéma monosite, notre approche à sites multiples permet de modéliser le comportement orthotrope du matériau. Sur la *figure IV.8*, pour laquelle l'axe des fibres est orienté suivant la direction 1, on observe que les résultats obtenus sont en bonne corrélation avec ceux de Begis et *al.* (1983).

L'approche autocohérente présentée précédemment permet d'obtenir des résultats similaires à ceux issus d'autres méthodes, Begis et *al.* (1983), Sangani & Lu (1987), Brockenbrough et *al.* (1992), Rodin (1993), et l'on peut retrouver ces comparaisons dans Zattarin & Lipinski (1997), ainsi que dans Zattarin et *al.* (1997^b). L'atout prépondérant de la méthode proposée est son aptitude à aborder un problème quel que soit sa complexité, puisque l'on peut approcher les tenseurs d'interaction pour des inclusions dont les textures cristallographiques, morphologiques et topologiques sont quelconques, et dont le milieu environnant peut être anisotrope. Les résultats sont moins probants en ce qui concerne la modélisation d'un matériau poreux, où lorsque la fraction volumique des vides devient trop importante, l'algorithme peut être amené à diverger. Il est alors nécessaire de scinder les calculs en étapes, où pour chacune d'elles on considère de faibles fractions volumiques. Ce procédé, appelé schéma autocohérent par étape, est présenté dans Vieville & Lipinski (1994), ainsi que Broohm et *al.* (1998).

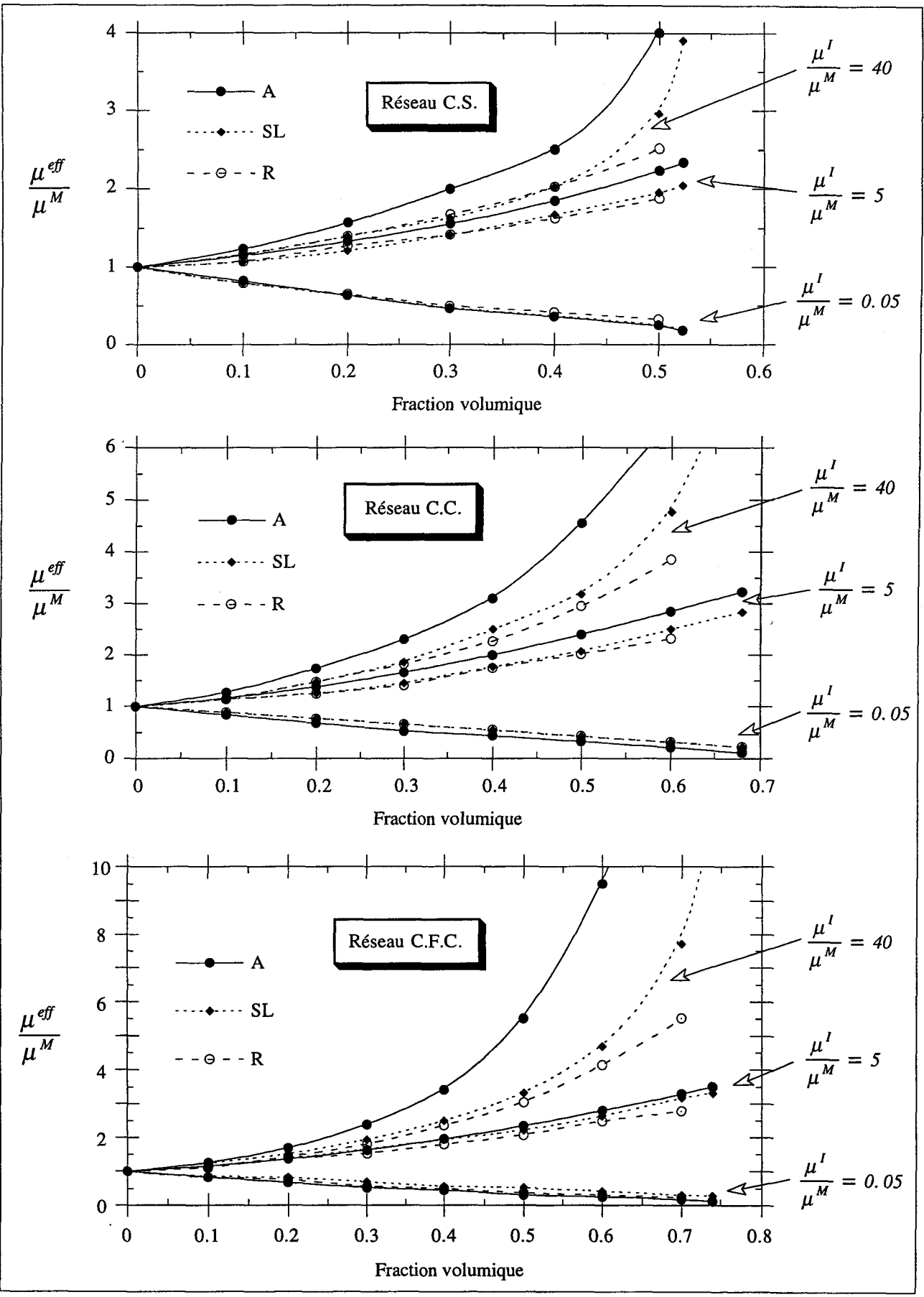


Figure IV.7 : Evolution du coefficient d'anisotropie, en fonction de la fraction volumique d'inclusions élastiques situées selon un réseau cubique, pour différentes méthodes : (A) Autocohérent, (R) Rodin, (SL) Sangani & Lu.

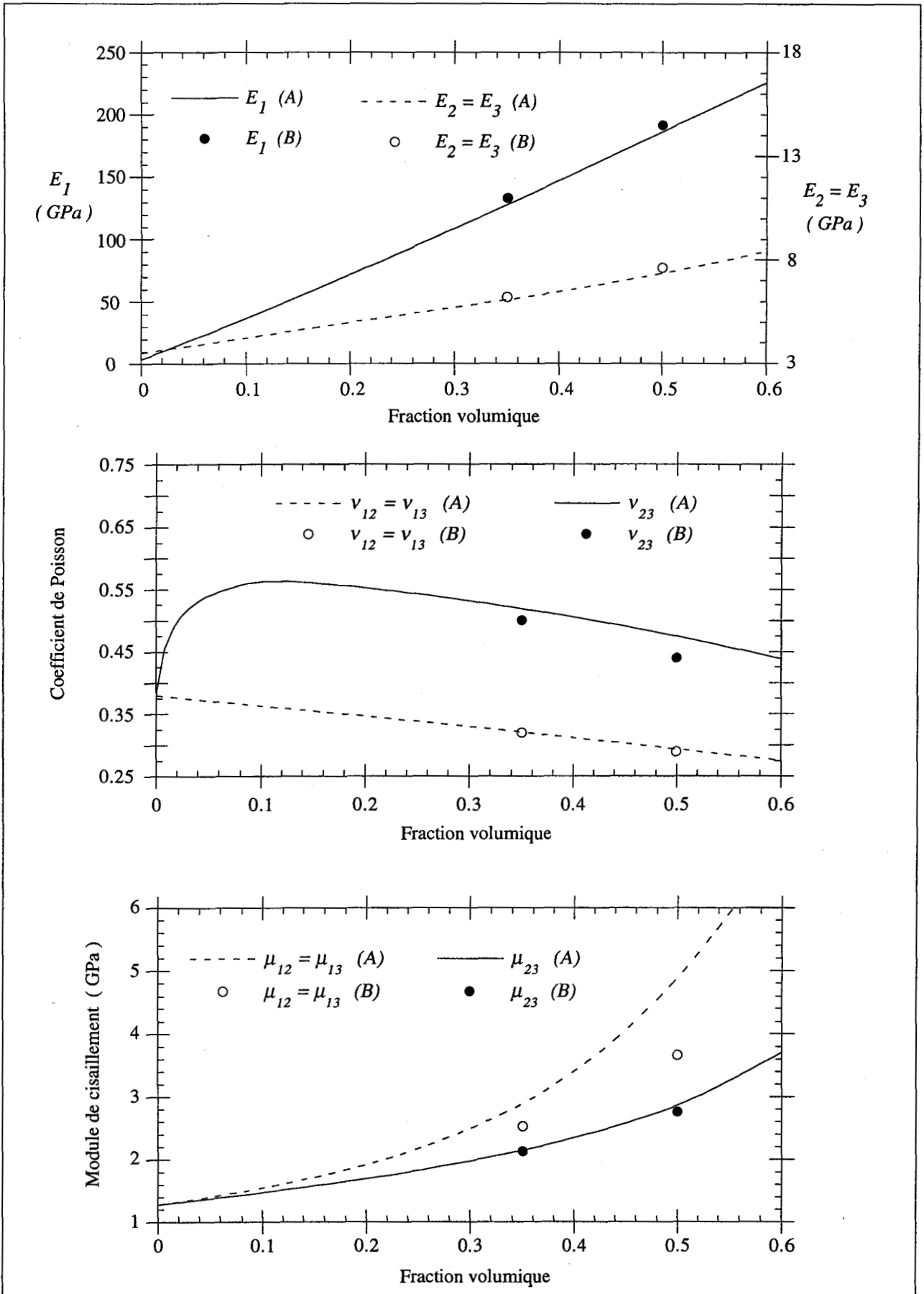


Figure IV.8 : Evolution des constantes élastiques (Modules d'Young, Coefficients de Poisson, Modules de cisaillement), en fonction de la fraction volumique des fibres, pour différentes méthodes : (A) Autocoherent, (B) Begis et al.

IV.2.2 - Détermination des modules tangents élastoplastiques macroscopiques

La procédure itérative exposée au paragraphe précédent demeure valable pour des calculs en élastoplasticité. La loi de comportement élastoplastique s'exprimant en taux de variables mécaniques, une approche incrémentale s'avère nécessaire, et permet alors d'éliminer le processus itératif précédent si les pas d'incrémentations sont suffisamment petits.

L'avantage principal des méthodes basées sur la transition d'échelles est qu'elles fournissent de précieuses informations concernant l'évolution de la structure interne du matériau. Cette évolution est liée à la précision de la description des mécanismes de la déformation plastique, ici, l'activation et la désactivation des systèmes de glissements. Par conséquent, cela impose des pas d'incrémentations très petits, et de plus, la convergence rapide de la méthode, prouvée en élasticité, permet d'espérer qu'une seule itération soit suffisante pour déterminer les propriétés tangentes macroscopiques du matériau avec une bonne précision. Des résultats obtenus par Hihi *et al.* (1987) et Beradaï *et al.* (1987) peuvent appuyer cette hypothèse.

L'organigramme de résolution en élastoplasticité est représenté sur la *figure IV.9*. Au départ des calculs, le tenseur des modules tangents macroscopiques est pris égal au tenseur des constantes élastiques du matériau déterminé par l'algorithme précédent, puis on effectue les étapes suivantes :

- ⇒ Calcul du tenseur T^{II} en fonction de L^{sc} obtenu à la fin de l'itération précédente.
- ⇒ Détermination des systèmes de glissement, en utilisant le critère de Schmid (III.10) et (III.11), à partir des systèmes potentiellement actifs. On propose dans le paragraphe suivant, une nouvelle procédure de choix des systèmes actifs.
- ⇒ La connaissance des systèmes actifs permet, par l'intermédiaire de la relation (III.27), d'obtenir l'expression du tenseur des modules tangents du constituant.
- ⇒ Calcul du terme ΔI^I .
- ⇒ Détermination du tenseur de localisation A^I du constituant.
- ⇒ Evolution de la microstructure du constituant, exposée au chapitre précédent, et qui réactualise les variables internes du monocristal.
- ⇒ Approximation du tenseur des modules tangents macroscopiques L^{eff} par le tenseur L^{sc} .
- ⇒ Incrémentations de la variable pilote, qui peut être soit la contrainte macroscopique ou bien la déformation macroscopique. Le processus s'arrête lorsque la variable pilote a atteint une valeur que l'on se fixe en début de calcul.

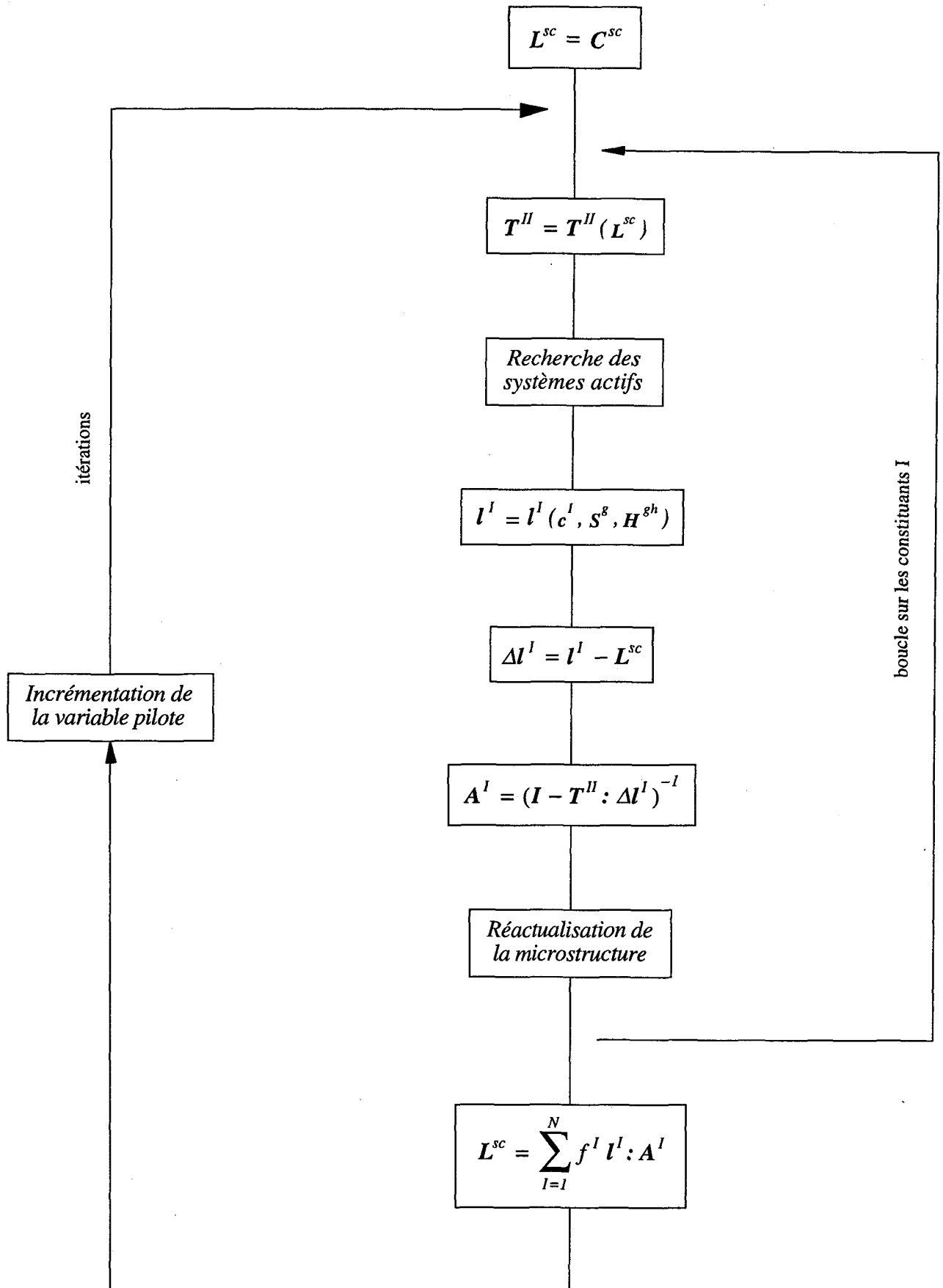


Figure IV.9 : Algorithme de la méthode autocohérente en élastoplasticité.

Dans la thèse de Lipinski (1993) on peut trouver des résultats obtenus par l'approche autocohérente, notamment en ce qui concerne l'influence du pas d'incrémentation, l'évolution de la microstructure ainsi que des comparaisons de textures cristallographiques calculées et expérimentales. L'implantation d'un tel modèle dans un code d'éléments finis nécessite de traiter une quantité importante de données, et constitue un inconvénient majeur en terme de temps de calcul. L'algorithme d'approximation numérique des tenseurs d'interaction que nous avons développé permet de réduire notablement les temps de calcul, et de plus nous proposons maintenant un nouveau critère de sélection des systèmes de glissements actifs.

IV.3 - Recherche des systèmes actifs

La détermination des systèmes actifs est basée sur les expressions (III.10) et (III.11) du critère de Schmid. Lorsque l'on applique un chargement à un polycristal, il existe, pour chaque monocristal, un certain nombre de systèmes vérifiant ce critère. Ce sont des systèmes potentiellement actifs, et leur nombre sera exprimé par le sigle *NSPA*, pour "Nombre de Systèmes Potentiellement Actifs".

Le problème est de trouver parmi ces systèmes la combinaison de ceux qui vont effectivement devenir actifs, et dont l'unicité a été discutée au chapitre III.

La sélection des systèmes de glissement actifs utilisée par Lipinski (1993), consiste à prendre parmi tous les systèmes potentiellement actifs, la combinaison dont l'énergie de déformation est minimale. Ce critère peut se mettre sous la forme :

$$\min_{CSPA} \left(\sum_{h=1}^{NSPA} \sum_{g=1}^{NSPA} \dot{\gamma}^g \left(R_{ij}^h c_{ijkl}^I R_{kl}^g + H^{gh} \right) \dot{\gamma}^h \right) \quad (IV.12)$$

où *CSPA* représente toutes les combinaisons des systèmes potentiellement actifs et dont le nombre total vaut 2^{NSPA} . La vitesse de cisaillement vérifie la relation suivante :

$$\dot{\gamma}^h \geq 0 \quad (IV.13)$$

Une telle procédure nécessite l'introduction du temps, qui ne correspond pas véritablement au "temps physique réel", mais plutôt à un paramètre permettant l'incrémentation des variables définissant le problème élastoplastique. Cela entraîne inévitablement une augmentation de la complexité des relations, donc de l'algorithme de résolution, d'où une perte probable de la précision des résultats. De plus, le nombre de 2^{NSPA} tests à effectuer impose une consommation excessive du temps de calcul.

On propose, ici, un critère basé sur les travaux de Leffers (1968) et Wierzbanski et *al.* (1992), qui consiste à activer un seul et unique système à la fois. Concrètement, on fixe un incrément de la variable pilote (taux de contrainte ou vitesse de déformation), puis on active le système h qui subit le chargement le plus important, c'est à dire sur lequel la différence entre la cission résolue et la cission critique est maximale. Dans ce cas on dépasse le critère de Schmid, puisque l'on a :

$$\tau^h - \tau_{cr}^h > 0 \quad (IV.14)$$

La vitesse de cisaillement $\dot{\gamma}^h$ permet alors d'obtenir un sous-incrément pendant lequel les cissions critiques (III.12) évoluent, ainsi que la déformation plastique (III.19), le taux de contrainte et l'orientation du réseau cristallin du monocristal considéré. Ce glissement plastique permet de décharger partiellement le système h , et dès lors un autre système peut être activé. Cette procédure est répétée jusqu'au moment où il n'y a plus de système vérifiant le critère (IV.14). A chaque nouveau système activé, il est important de vérifier qu'il soit linéairement indépendant de ceux répertoriés depuis le début de l'incrément. Lorsqu'il n'y a plus d'activation, la combinaison des systèmes linéairement indépendants ainsi obtenue, permet de déterminer le tenseur des modules tangents du monocristal par l'intermédiaire de la relation (III.27). Cependant, pour mettre en pratique cette méthode, il est indispensable de relier directement le taux de contrainte avec la vitesse de déformation plastique, et nécessite une reformulation des équations.

IV.4 - Loi de comportement élastoplastique

On propose, pour le calcul du taux de contrainte dans un grain, une relation de la forme :

$$\dot{\sigma}_{ij} = \dot{S}_{ij} + \lambda_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^p \quad (IV.15)$$

où \dot{S} dépend de la variable macroscopique pilote ($\dot{\Sigma}$ ou \dot{E}). Pour identifier \dot{S} et λ , introduits dans la relation (IV.15), on utilise l'expression (III.66) de l'équation intégrale dans le cas d'une modélisation à un site, où la vitesse de déformation dans un monocristal est :

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{E}_{ij} + T_{ijkl}^H \Delta l_{klmn} \dot{\epsilon}_{mn} \quad (IV.16)$$

On peut réécrire cette équation de la manière suivante :

$$\dot{\sigma}_{ij} = \dot{\Sigma}_{ij} + L_{ijkl}^* (\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{E}_{kl}) \quad (IV.17)$$

où L^* représente le tenseur de Hill défini par :

$$L_{ijkl}^* = L_{ijkl}^{eff} + (T_{ijkl}^{II})^{-1} \quad (IV.18)$$

On décompose ensuite la vitesse de déformation en une partie élastique et une partie plastique suivant l'équation (III.22). De plus, la vitesse de déformation élastique peut s'écrire en fonction du taux de contrainte par l'intermédiaire du tenseur des compliances, noté s :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^e = s_{ijkl} \dot{\sigma}_{kl} \quad (IV.19)$$

La relation (IV.17) devient alors :

$$\dot{\sigma}_{ij} = B_{ijkl} \dot{\Sigma}_{kl} - B_{ijkl} L_{klmn}^* \dot{E}_{mn} + \lambda_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^p \quad (IV.20)$$

où :

$$B_{ijkl} = (I_{ijkl} - L_{ijmn}^* s_{mnkl})^{-1} \quad (IV.21)$$

$$\lambda_{ijkl} = B_{ijmn} L_{mnkl}^* \quad (IV.22)$$

Il est nécessaire, maintenant, de préciser la variable pilote, c'est à dire si dans l'équation (IV.15), le terme \dot{S} s'écrit en fonction du taux de contrainte macroscopique ou de la vitesse de déformation macroscopique. Ce calcul s'effectue à partir de la relation (IV.20), et l'on obtient :

- ◆ si la variable pilote est le taux de contrainte macroscopique :

$$\dot{S}_{ij} = -B_{ijkl} (L_{klmn}^{eff} T_{mnop}^{II})^{-1} \dot{\Sigma}_{op} \quad (IV.23)$$

- ◆ si la variable pilote est la vitesse de déformation macroscopique :

$$\dot{S}_{ij} = -B_{ijkl} (T_{klmn}^{II})^{-1} \dot{E}_{mn} \quad (IV.24)$$

Les relations étant mises en place, il s'agit à présent de valider le modèle. Dans un premier temps on met en évidence les améliorations, en terme de gain de temps et de précision, obtenues par l'introduction des nouveaux algorithmes. En effet, à l'approche autocohérente classique où l'on considère l'activation simultanée de plusieurs systèmes de glissements, nous proposons un modèle

dans lequel nous avons une série de glissements simples de chaque système sollicité. De plus, comme nous l'avons vu en début de ce chapitre, l'approximation numérique du tenseur d'interaction T^{II} a été considérablement améliorée. Cette confrontation ainsi faite, on termine la validation de notre modèle par des comparaisons de résultats obtenus avec ceux issus d'essais expérimentaux.

IV.5 - Applications

IV.5.1 - Validation du modèle proposé

La démarche proposée, qui consiste à approcher le glissement multiple par une succession de glissements simples, permet d'éviter les nombreux tests de recherche des systèmes linéairement indépendants. La *figure IV.10* représente le temps de calcul, relatif entre les deux méthodes, pour une simulation de traction uniaxiale d'un polycristal jusqu'à une déformation totale macroscopique de 10%. Le temps nécessaire à cette simulation dépend linéairement du nombre de grains pris en considération. On observe que l'algorithme proposé permet de diviser ce temps par un facteur d'environ de deux. Un tel gain de temps est du plus grand intérêt lors du couplage de ce modèle avec un code d'éléments finis, étant donné que, d'après Dawson et *al.* (1994), le calcul cristallin peut représenter jusqu'à 95 % du temps total.

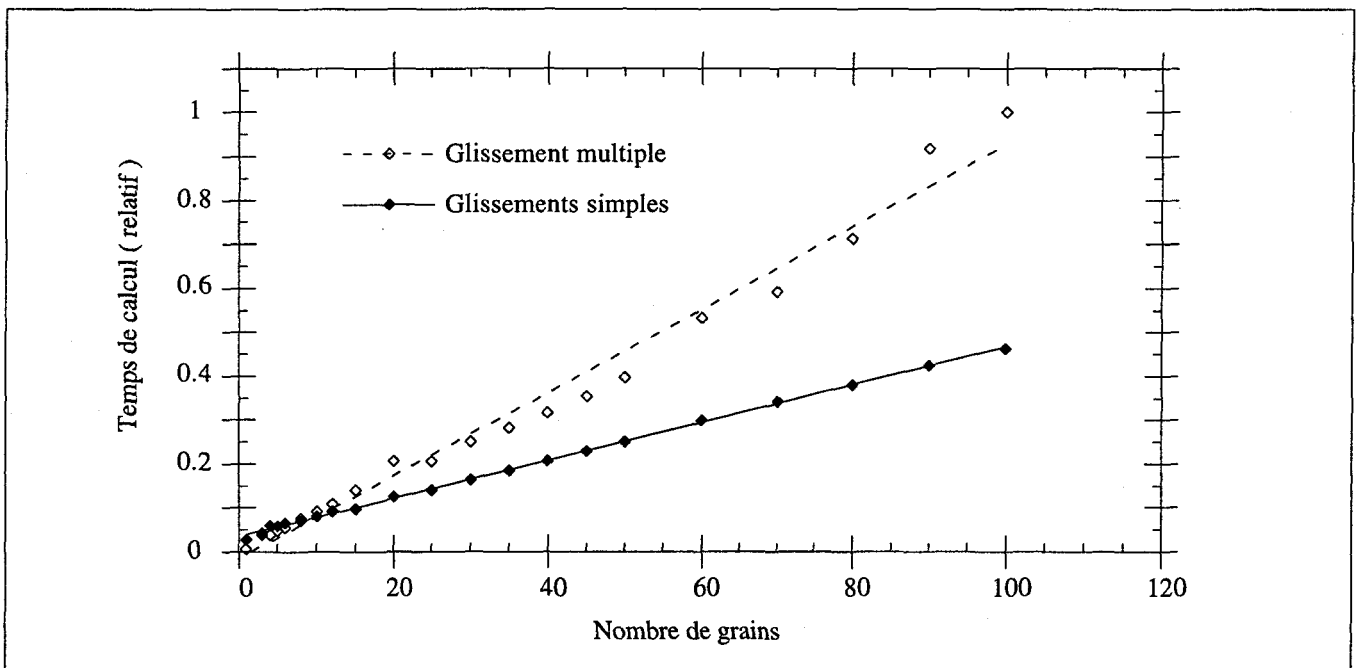


Figure IV.10 : Temps de calcul, relatif entre les deux méthodes présentées, en fonction du nombre de grains considérés pour la modélisation.

Lors d'une modélisation, pour avoir un temps de calcul acceptable, il est nécessaire de ne pas prendre en compte un nombre de grains trop important. Mais, celui-ci doit être suffisant afin de représenter correctement la microstructure du matériau, pour lequel on suppose que les grains du polycristal à l'état initial ont des réseaux cristallographiques orientés aléatoirement. La *figure IV.11* représente les courbes issues de modélisations de tractions uniaxiales pour plusieurs volumes élémentaires, contenant chacun d'eux un nombre de grains différents. On y a représenté l'évolution de la contrainte équivalente en fonction de la déformation équivalente, définies au sens de Von Mises et notées respectivement Σ_{eq} et E_{eq} . On observe un écart entre les courbes, qui diminue lorsque le nombre de grains augmente et se stabilisant pour une modélisation de 100 grains et plus. Par conséquent, on choisit, par la suite, comme volume élémentaire représentatif du matériau, un polycristal constitué de 100 grains.

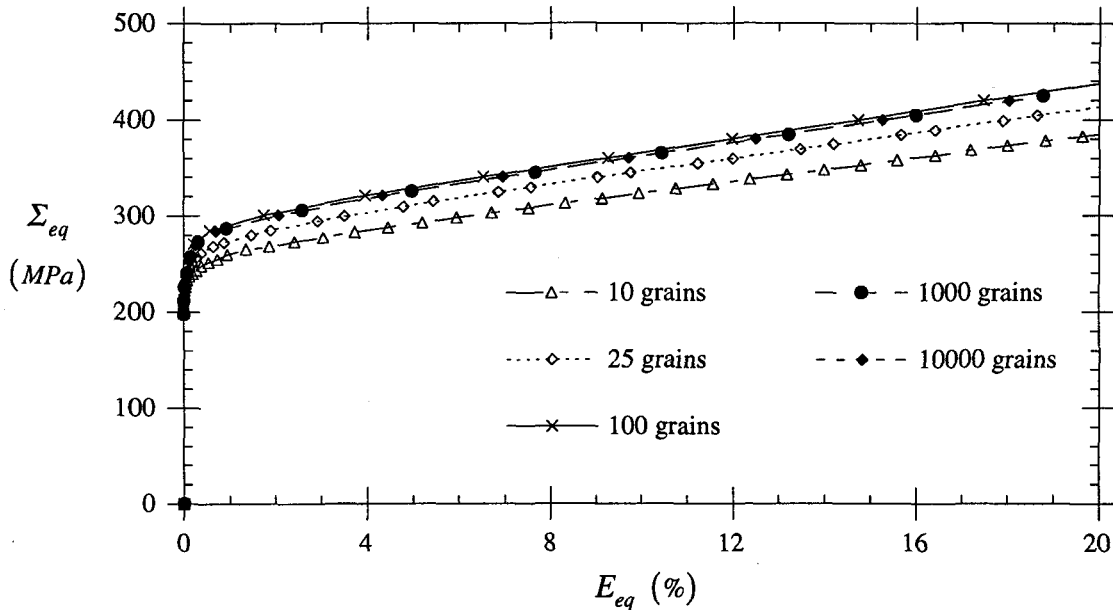


Figure IV.11 : Evolution de la courbe de traction en fonction du nombre de grains considérés.

On établit la validation du modèle proposé dans trois cas de chargements simples, qui sont :

- ◆ Un essai de traction uniaxiale, pour lequel le chargement est piloté par un taux de contraintes macroscopiques de la forme suivante :

$$\dot{\Sigma} = \begin{pmatrix} \dot{\Sigma}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (IV.25)$$

- ◆ Un essai de cisaillement pur, pour lequel on a :

$$\dot{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\Sigma}_{12} & 0 \\ \dot{\Sigma}_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.26})$$

- ◆ Un essai de laminage, pour lequel on a :

$$\dot{\Sigma} = \begin{pmatrix} \dot{\Sigma}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\Sigma}_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.27})$$

La *figure IV.12* représente les courbes $\Sigma_{eq} = f(E_{eq})$ pour les différents cas de chargements présentés. On constate que le modèle proposé fournit des résultats quasi identiques à ceux issus d'une approche autocohérente classique considérant le glissement multiple homogène. Il s'agit à présent d'analyser la précision des résultats obtenue par l'approche que nous avons développée. En effet, les approximations numériques successives inhérentes à la programmation informatique des modèles, engendrent des imprécisions de résultats qui se répercutent notamment sur les composantes du tenseur des contraintes macroscopiques. La *figure IV.13* représente les imprécisions de calculs pour les différents cas de chargements étudiés :

- ◆ Lors d'un essai de traction suivant la direction 1, l'erreur la plus importante se situe sur la composante Σ_{22} (ou Σ_{33}) du tenseur des contraintes. On constate que l'utilisation du modèle proposé permet d'obtenir une imprécision plus faible par rapport à une approche classique. Cette erreur représente environ 0,3% de la composante Σ_{eq} (pour une déformation totale de 10%), comparée à 1% avec l'approche classique.
- ◆ Pour l'essai de cisaillement, l'erreur sur la composante Σ_{11} représente 0,2% de la composante Σ_{eq} lors de l'utilisation du modèle proposé, alors qu'elle représente environ 0,9% avec l'approche classique.
- ◆ Pour l'essai de laminage, l'erreur sur la composante Σ_{33} représente 0,4% de la composante Σ_{eq} , comparée à 1,7% avec l'approche classique.

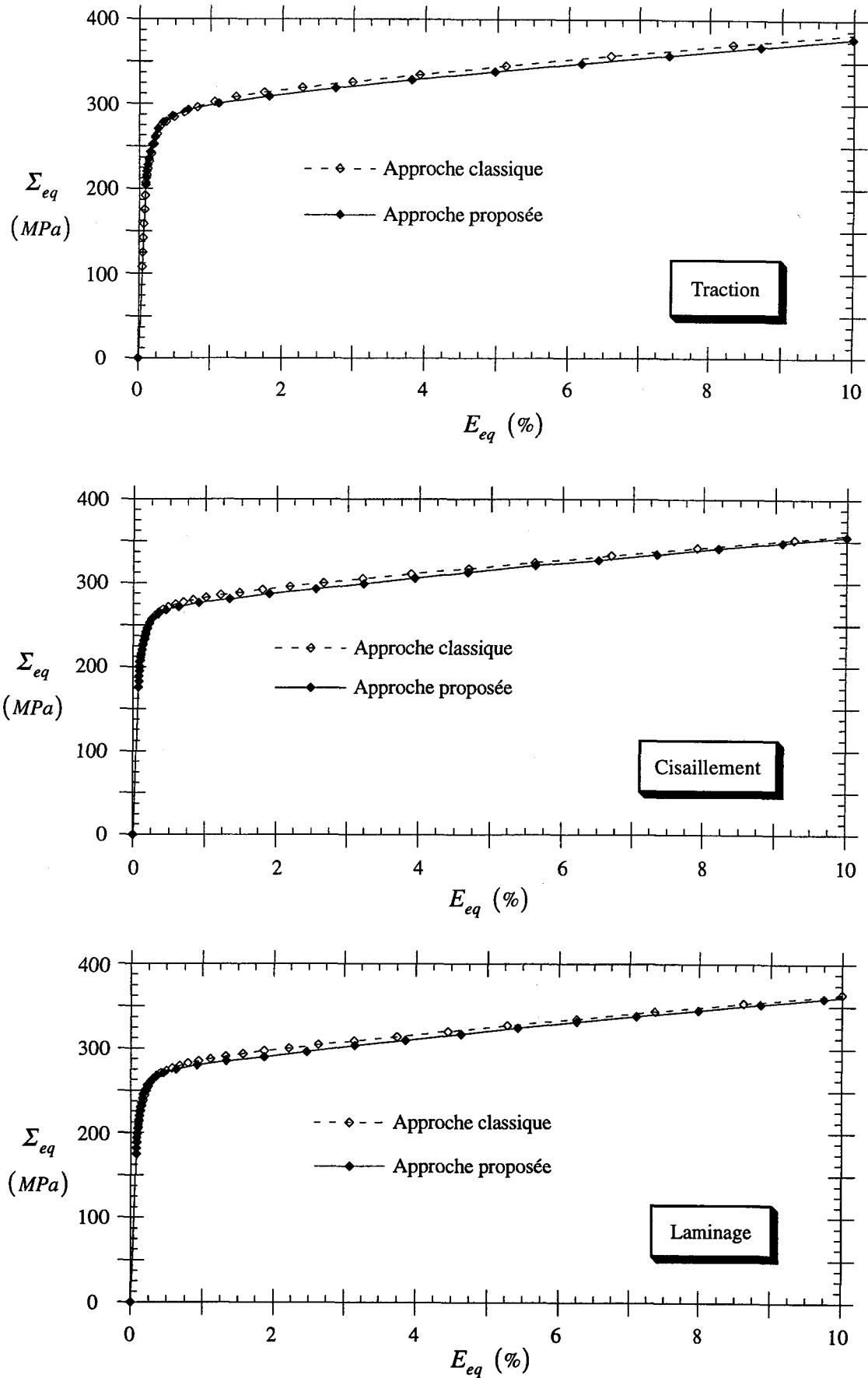


Figure IV.12 : Evolution de la contrainte macroscopique équivalente en fonction de la déformation macroscopique équivalente, obtenue avec la méthode proposée et une approche classique.

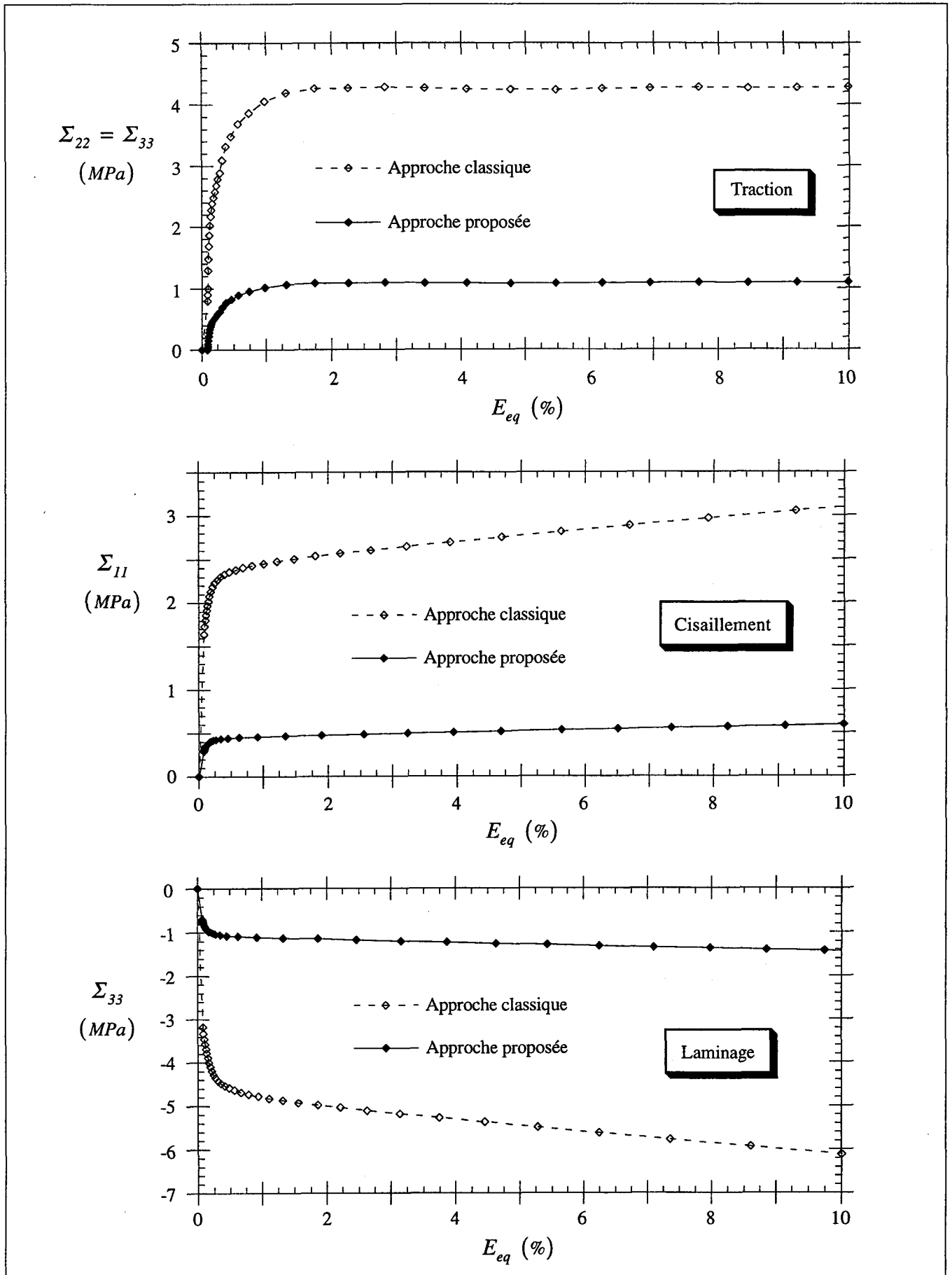


Figure IV.13 : Evolution des imprécisions numériques en fonction de la déformation macroscopique équivalente, obtenues avec le modèle proposé et une méthode autocohérente classique.

Comme nous l'avons vu, le fait de remplacer le glissement multiple qui intervient lors d'une incrémentation de la variable pilote par une succession de glissements simples, permet de diminuer notablement le temps d'exécution des calculs. Il s'agit à présent d'analyser la conséquence sur l'activation des systèmes de glissement déterminés par le modèle que nous avons développé, par rapport à une approche autocohérente classique. Sur la *figure IV.14*, nous avons représenté l'évolution, en fonction de la déformation équivalente, du nombre de systèmes de glissements actifs moyens dans un grain du polycristal, pour les différents cas de chargements précédemment décrits. On remarque une croissance rapide du nombre de systèmes actifs jusqu'à 2% de déformation, puis une stabilisation entre 3,5 et 4 systèmes, dépendant du type de chargement imposé. On constate de plus une bonne corrélation des résultats entre la méthode proposée et une approche classique.

Les résultats présentés témoignent de l'efficacité notable, en terme de rapidité et de précision des résultats, de l'algorithme de construction de la solution, associé au modèle que nous avons développé. Malgré l'hypothèse d'un mécanisme de déformation du monocristal par des glissements simples, l'approche proposée ne nuit pas à la modélisation du phénomène de glissements des plans cristallographiques. En effet, on constate que les combinaisons des systèmes actifs obtenues lors de chaque incrément, est identique à celles données par la méthode autocohérente classique, considérant le glissement multiple homogène.

On a vu que le principal avantage de l'approche cristallographique est qu'elle permet de prendre en compte les phénomènes microstructuraux. Agissant directement sur l'évolution géométrique de la surface de plasticité, ils jouent un rôle prépondérant sur le comportement mécanique du matériau, notamment dans le cas de chargements multiaxiaux ou cycliques. Dans le paragraphe suivant, on met en relief les paramètres microstructuraux dont l'évolution influe considérablement sur la forme de la surface.

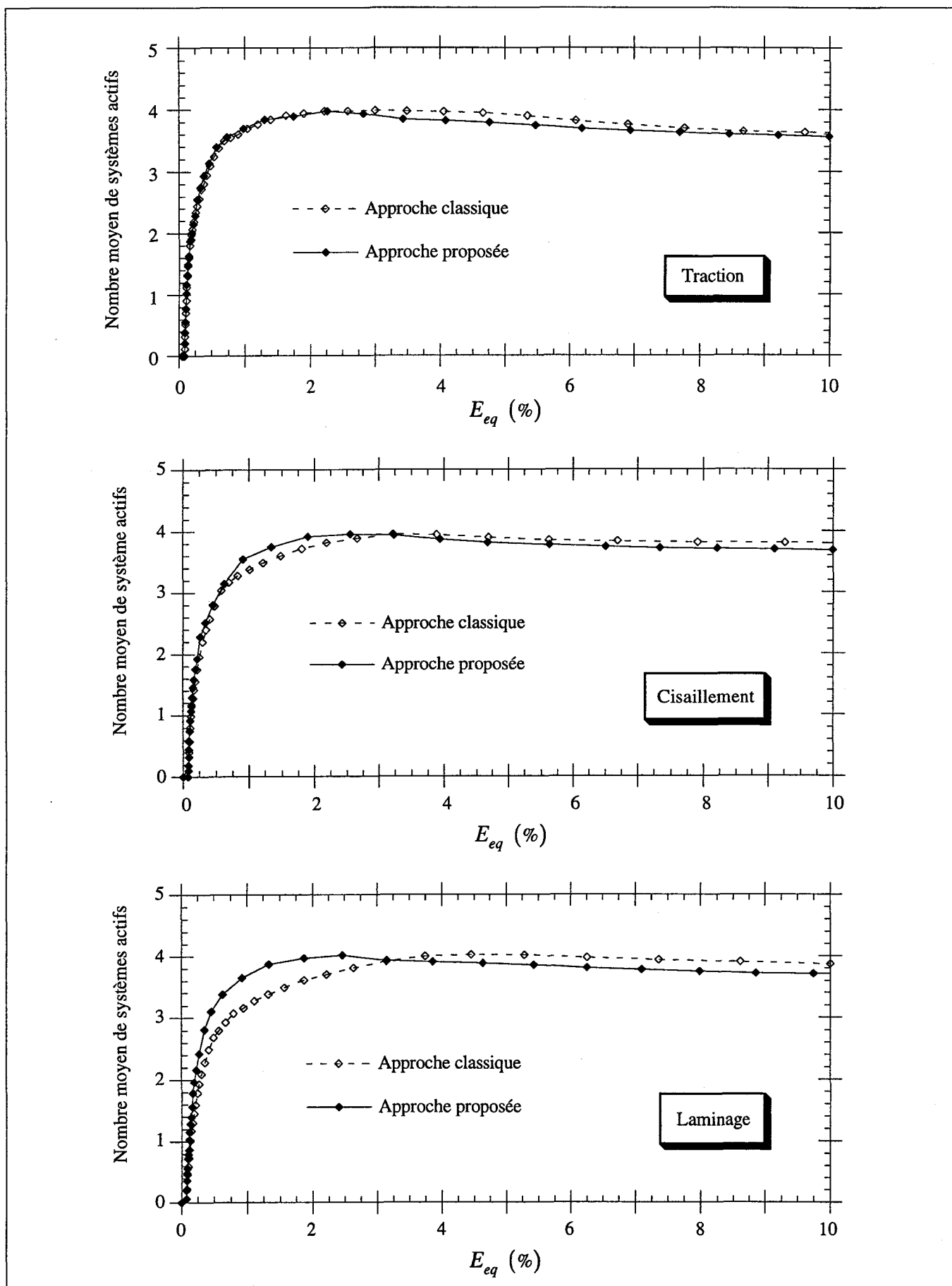


Figure IV.14 : Evolution du nombre moyen de systèmes actifs dans un grain du polycristal en fonction de la déformation macroscopique équivalente, obtenue avec la méthode proposée et une approche classique.

IV.5.2 - Evolution de la surface de plasticité

Dans cette partie, nous présentons les résultats obtenus à partir de la formulation autocohérente précédemment proposée. Nous fixons le seuil utilisé pour définir la limite élastique à 0.01% de déformation plastique équivalente. On peut trouver dans Lipinski (1993), une étude caractérisant l'influence de la valeur de cette limite sur la surface de plasticité.

Les figures IV.15 et IV.16 sont relatives aux surfaces de plasticité représentées dans l'espace des contraintes $(\Sigma_{11}, \Sigma_{12})$, et représentent respectivement une simulation d'un essai de traction et de cisaillement. On observe que la forme de la surface après différentes prédéformations plastiques se distingue dans un premier temps par le type de chargement imposé. Sur ces figures nous avons également fait figurer l'incrément de déformation plastique macroscopique dE^P calculé par le modèle proposé, pour un point de la surface. On constate que ce vecteur est conforme à la condition de normalité abordée par la théorie de la plasticité associée et définie par la relation (II.16) ou (III.2).

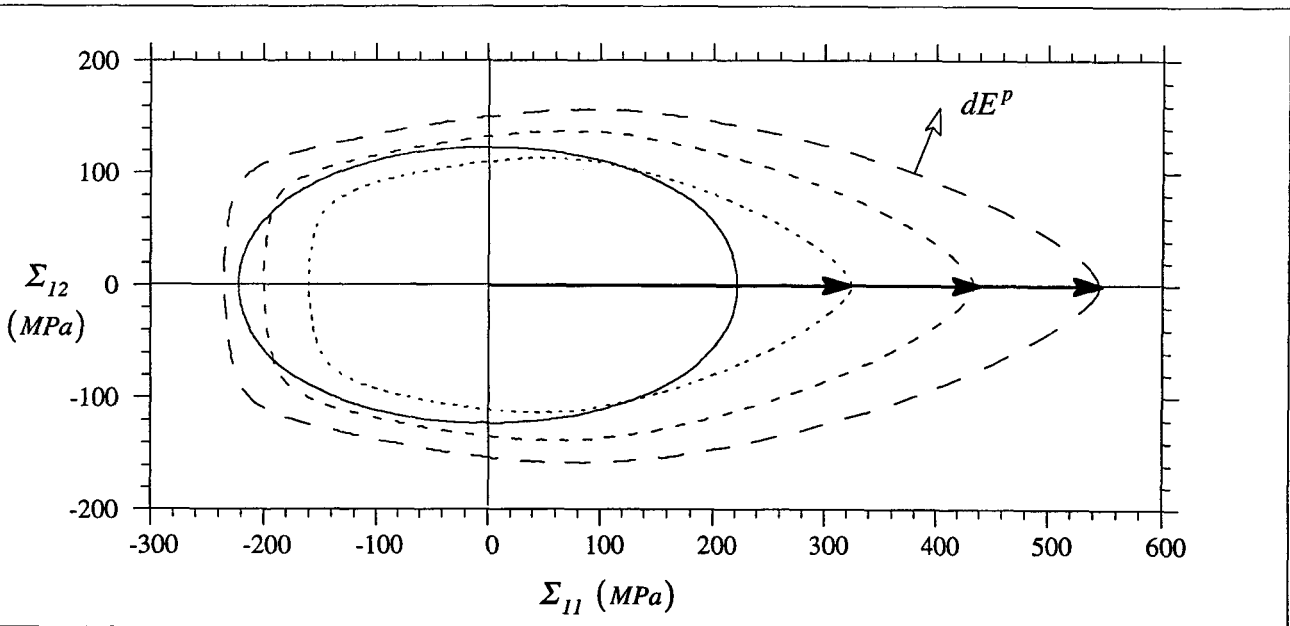


Figure IV.15 : Evolution de la surface de plasticité après une prédéformation en traction de 0%, 5%, 20% et 35%.

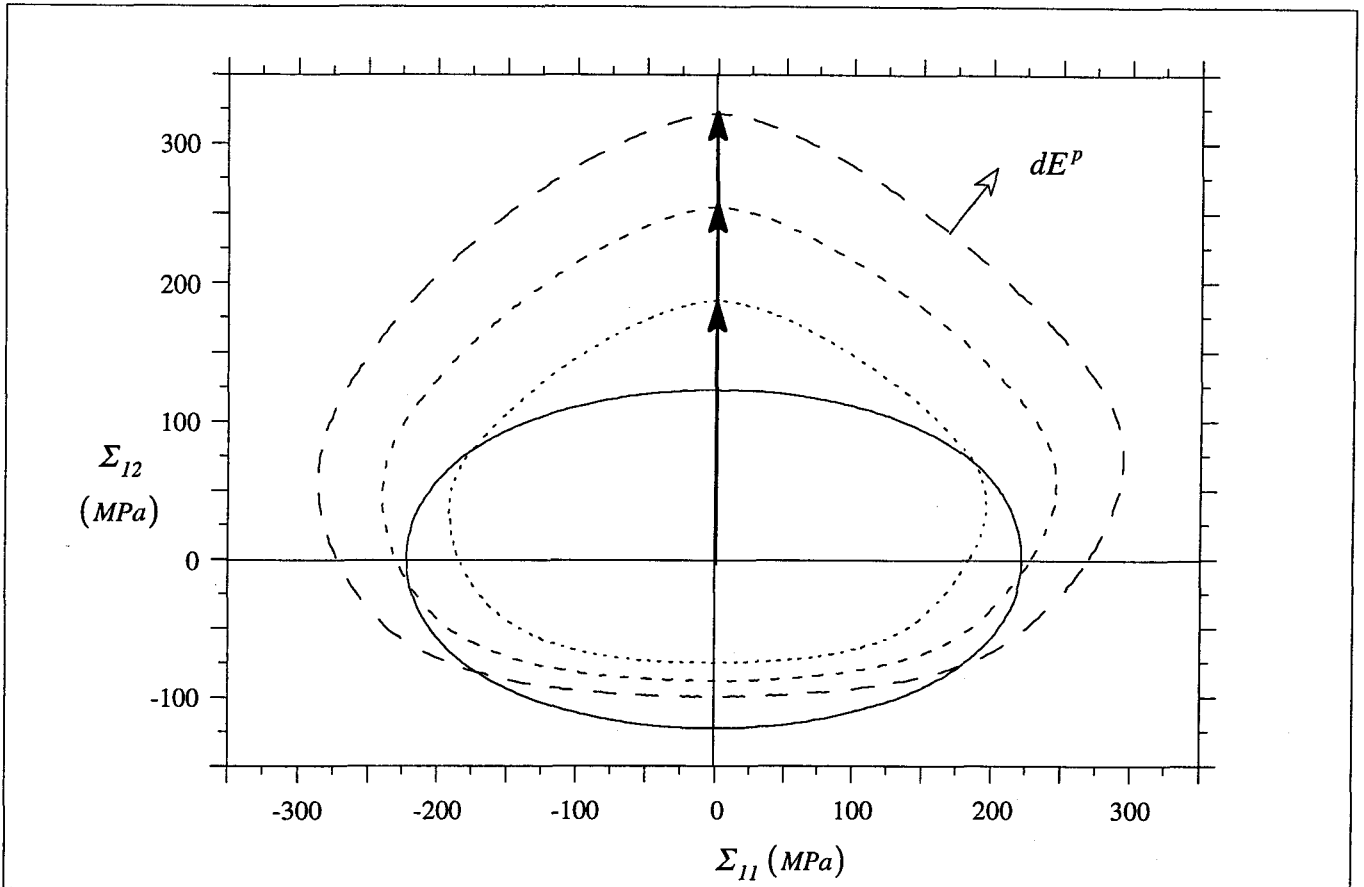


Figure IV.16 : Evolution de la surface de plasticité après une prédeformation en cisaillement de 0%, 5%, 20% et 35%.

Les figures IV.17 et IV.18 représentent les surfaces de plasticité calculées, définies dans l'espace des contraintes $(\Sigma_{11}, \Sigma_{22})$, et qui caractérisent respectivement un essai de traction et de laminage. On remarque, de nouveau, que la forme de la surface après prédeformation dépend du trajet de chargement.

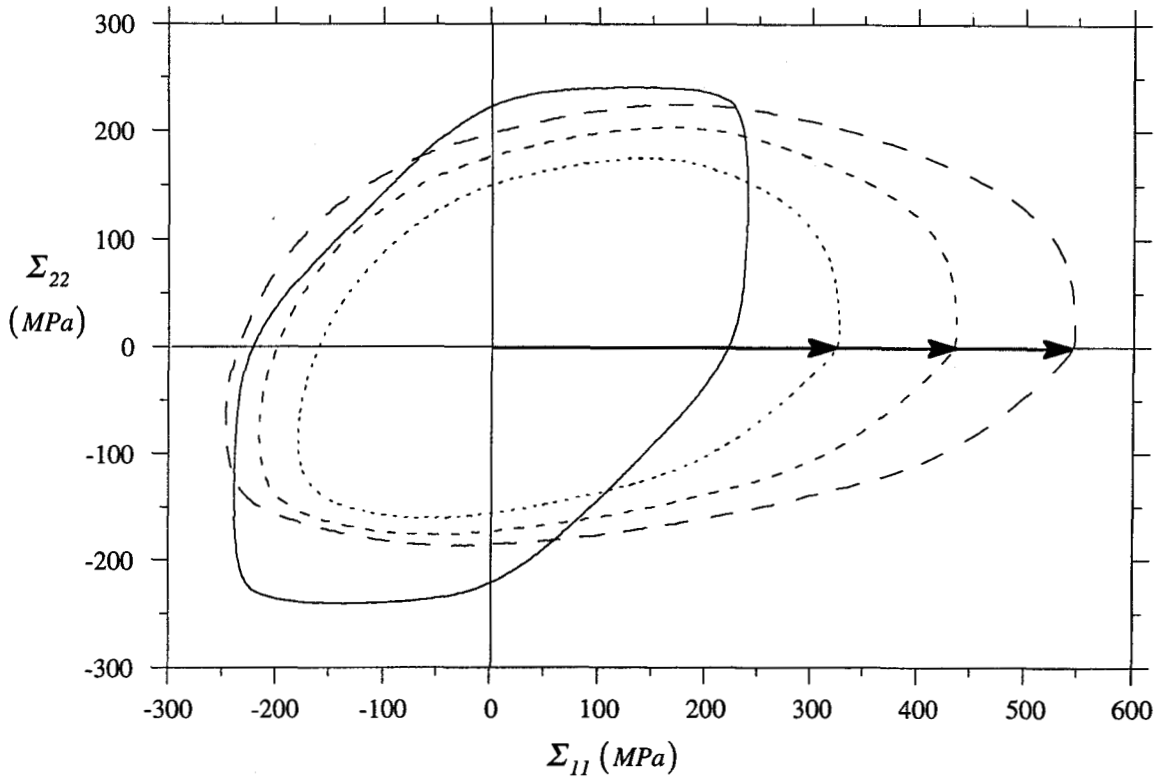


Figure IV.17 : Evolution de la surface de plasticité après une prédéformation en traction de 0%, 5%, 20% et 35%.

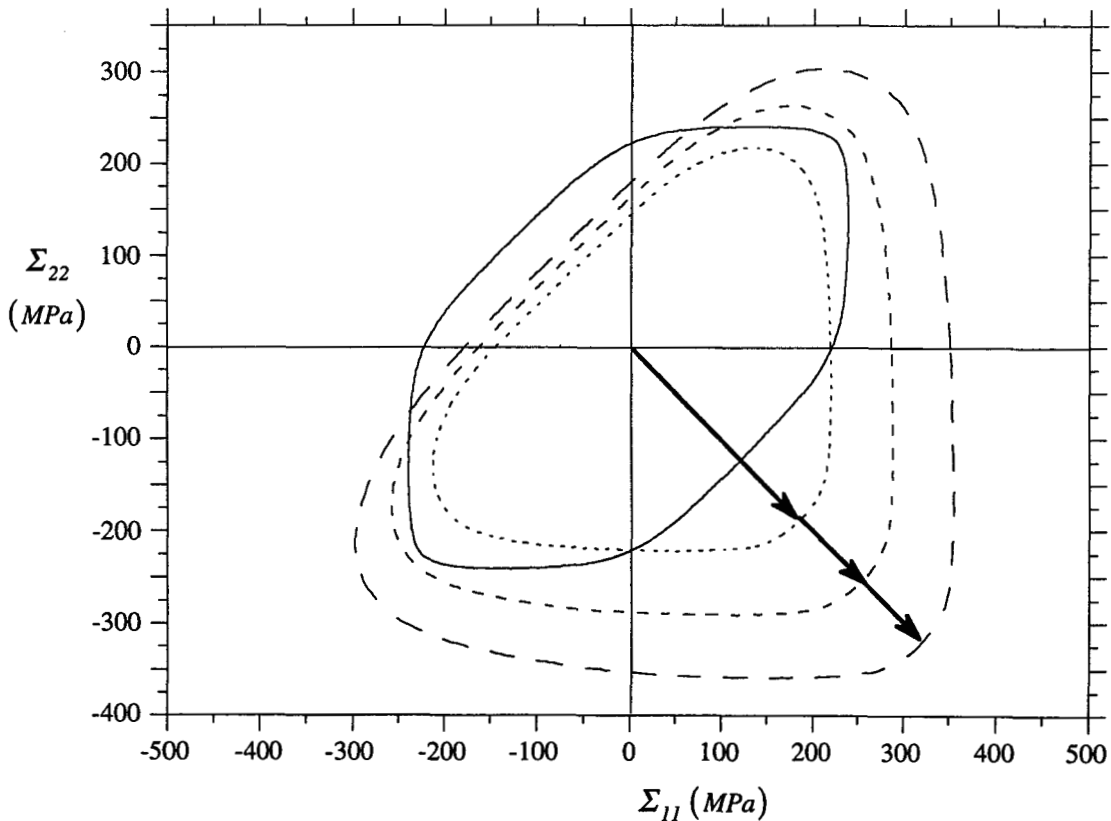


Figure IV.18: Evolution de la surface de plasticité en fonction du taux de laminage (0%, 5%, 20% et 35%).

D'une manière générale, on constate que l'expansion de la surface est d'autant plus importante que le taux de prédéformation est élevé. En représentant les surfaces de plasticité dans un espace des contraintes normalisé par rapport à la direction de chargement, on fait abstraction de cette expansion et cela permet de caractériser uniquement la forme relative de la surface. Les figures IV.19 à IV.22 retracent respectivement les figures IV.15 à IV.18 rapportées à un tel espace. On observe, que pour un trajet de chargement donné, la forme de surface de plasticité évolue aussi en fonction du taux de prédéformation. La surface a tendance à s'affiner, le rapport entre ses dimensions caractéristiques et celle mesurée dans la direction du chargement diminue. Cet effet Bauschinger a une évolution rapide dès le début du chargement pour de faibles prédéformations plastiques. Dans le cas de préchargements plus intenses, on note une augmentation (valeur absolue) du seuil d'écoulement dans la direction opposée, mais de façon moins rapide que le seuil dans la direction de chargement. Cette évolution est conforme aux observations expérimentales de Shiratori *et al.* (1977), et Bui (1964). Ce phénomène est dû à l'évolution de l'état interne du matériau, en particulier à l'apparition de contraintes internes intragranulaires et d'une texture cristallographique induite.

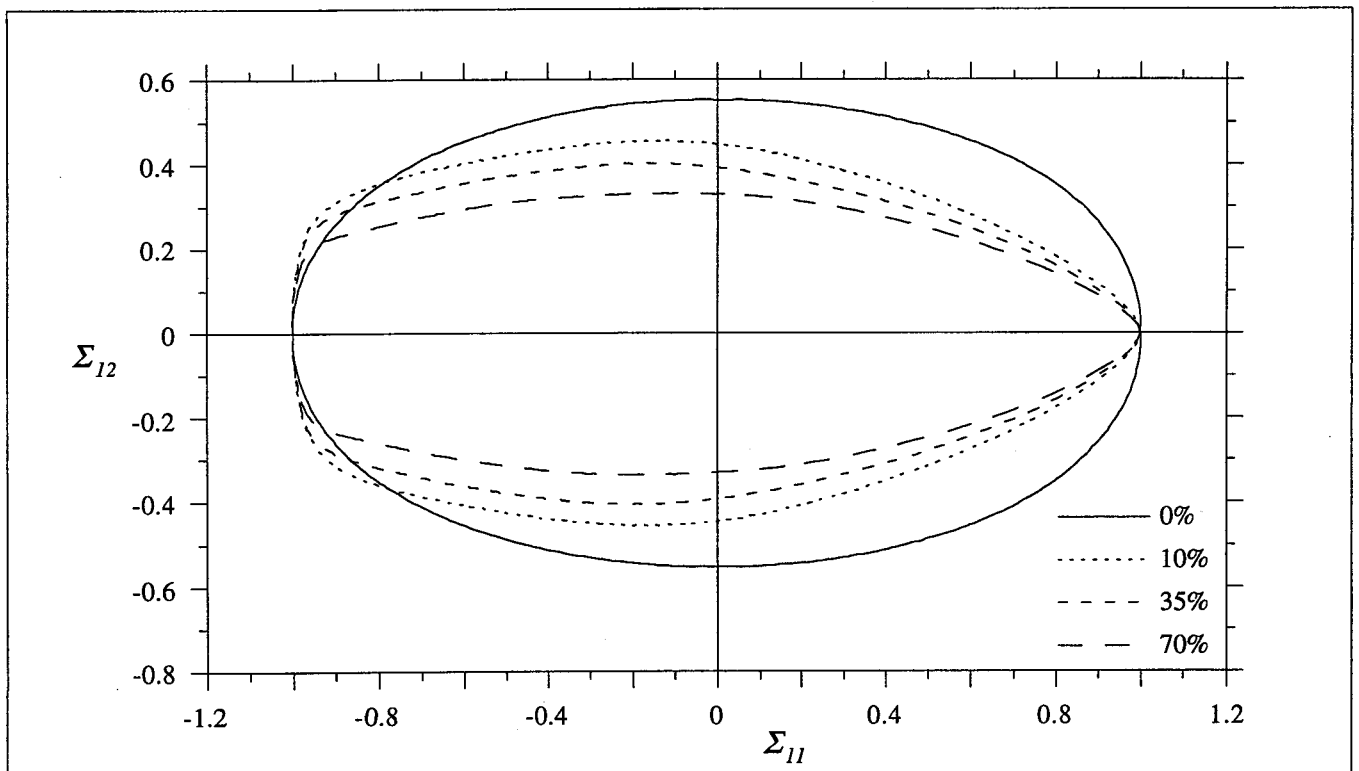


Figure IV.19 : Evolution de la forme relative de la surface de plasticité en fonction du taux de prédéformation en traction.

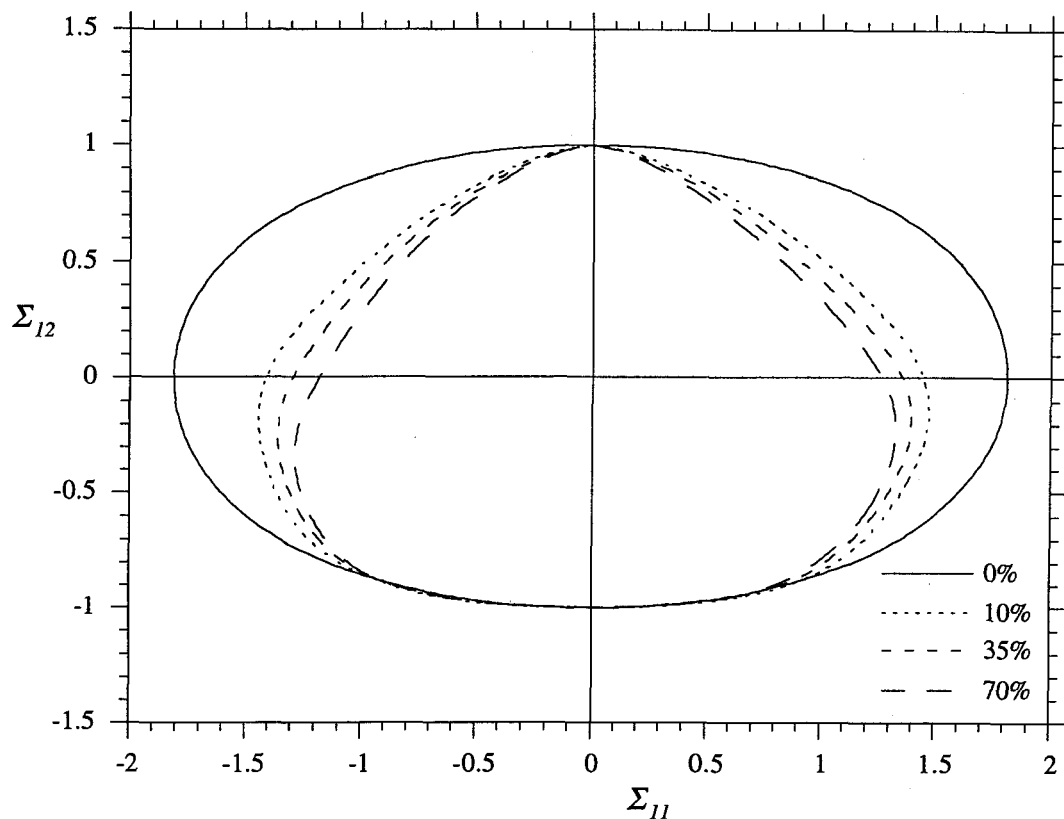


Figure IV.20 : Evolution de la forme relative de la surface de plasticité en fonction du taux de prédéformation en cisaillement.

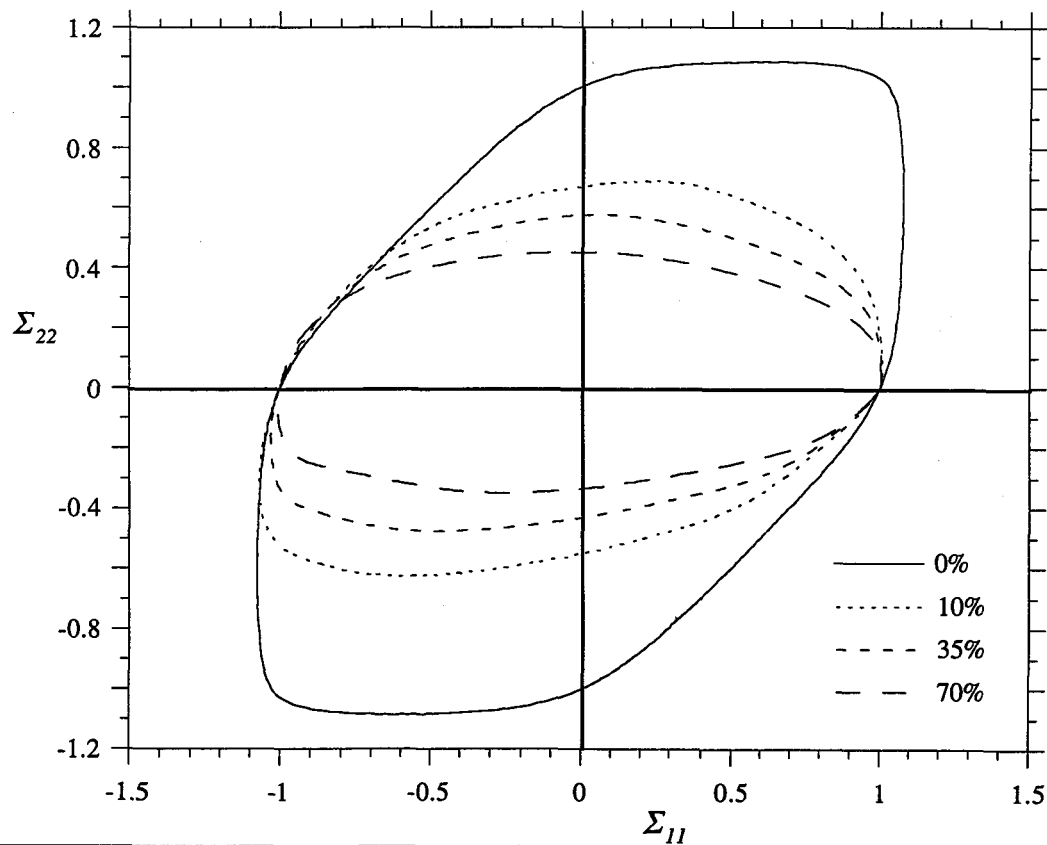


Figure IV.21 : Evolution de la forme relative de la surface de plasticité en fonction du taux de prédéformation en traction.

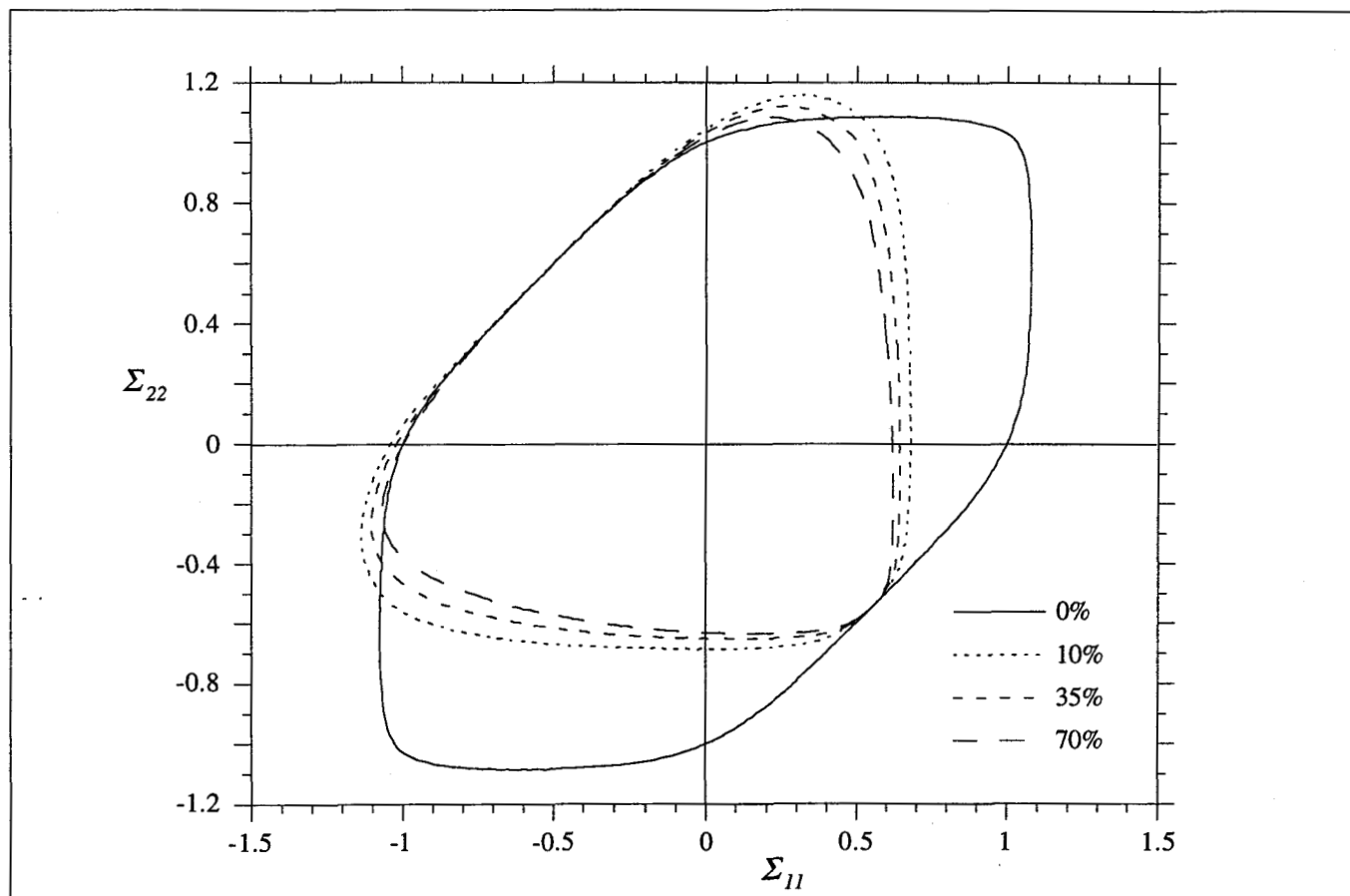


Figure IV.22 : Evolution de la forme relative de la surface de plasticité en fonction du taux de prédéformation de laminage.

Du fait des incompatibilités de la déformation plastique, l'état de contraintes dans les grains n'est pas identique à la contrainte macroscopique appliquée lors d'un écoulement plastique. Ces contraintes internes d'ordre 2 engendrent, après un chargement et une décharge, l'apparition de contraintes résiduelles, en partie responsables de la physionomie de la surface de plasticité après une prédéformation. Ces contraintes sont conformes à la relation d'équilibre suivante :

$$\sum_I f^I \sigma_{ij}^I = 0 \quad (\text{IV.28})$$

La figure IV.23 représente, pour quatre grains du polycristal, le rapport des contraintes équivalentes résiduelles avec la contrainte équivalente macroscopique, en fonction de la déformation équivalente, pour les différents trajets de chargements précédemment étudiés. On observe une évolution rapide jusqu'à environ 1% de déformation macroscopique suivie d'une stabilisation.

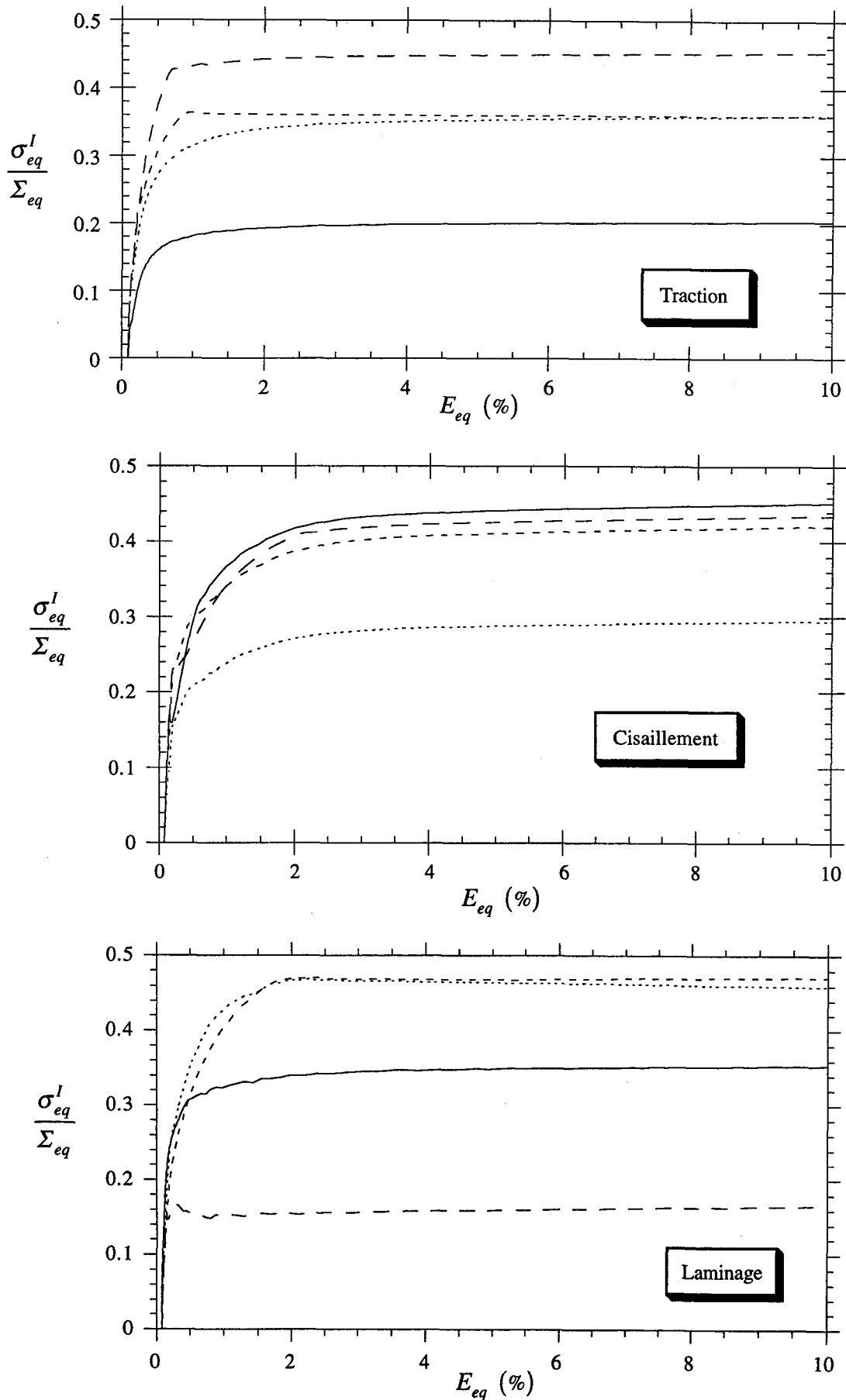


Figure IV.23 : Evolution des contraintes résiduelles par rapport à la contrainte macroscopique, en fonction de la déformation équivalente.

La rotation du réseau cristallographique joue également un rôle notable sur la forme de la surface de plasticité. Nous avons vu dans le chapitre III, avec les relations (III.77), que l'évolution des angles d'Euler du réseau ne dépend uniquement que du taux de rotation élastique.

Les figures IV.24 à IV.26 représentent l'évolution des orientations cristallines (simulées pour un volume élémentaire comportant 500 grains) en fonction de l'amplitude de déformation pour un trajet de chargement donné. On constate que la texture devient plus accentuée lorsque la déformation progresse. On peut trouver, dans Baczmanski et *al.* (1998), des comparaisons entre des textures cristallographiques expérimentales et celles issues de la méthode présentée. Cette texture induite est, en grande partie, responsable de l'évolution de la forme de la surface de plasticité pour des grandes transformations.

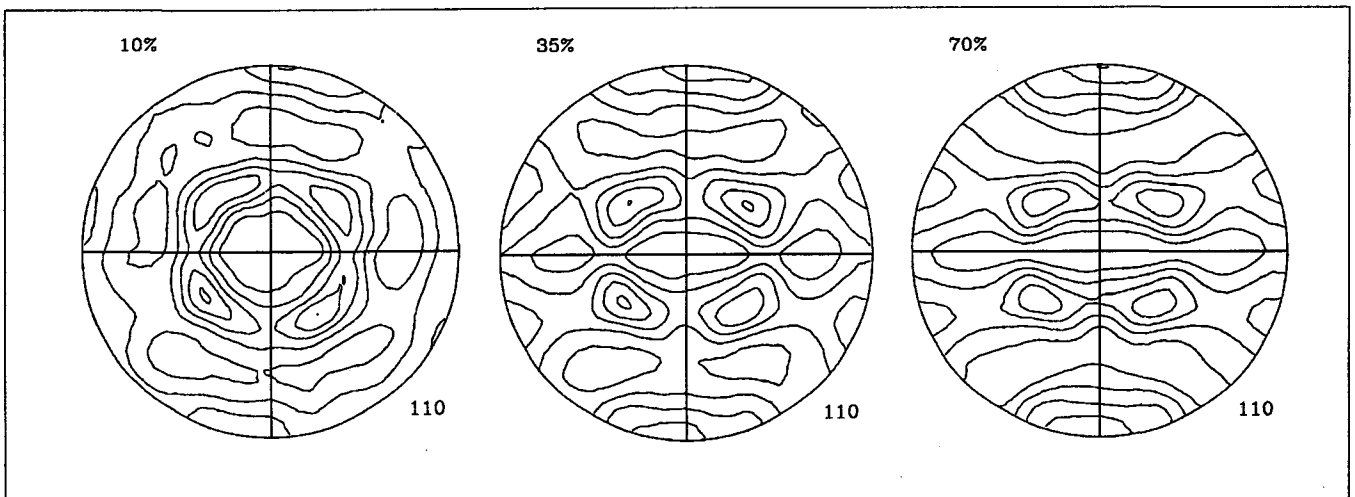


Figure IV.24 : Evolution de la texture en fonction de l'amplitude de la déformation en traction.

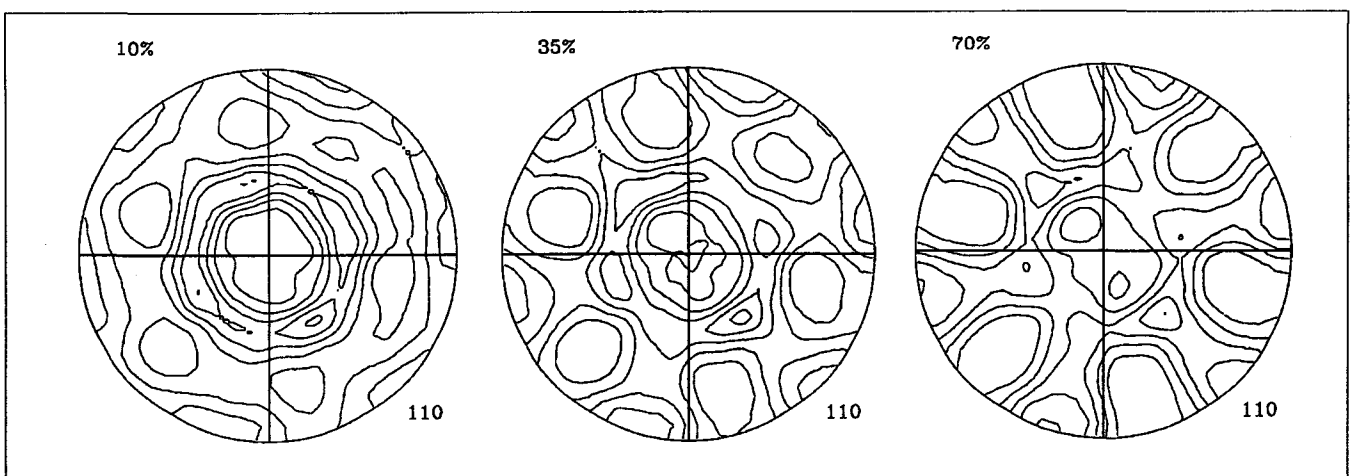


Figure IV.25 : Evolution de la texture en fonction de l'amplitude de la déformation en cisaillement.

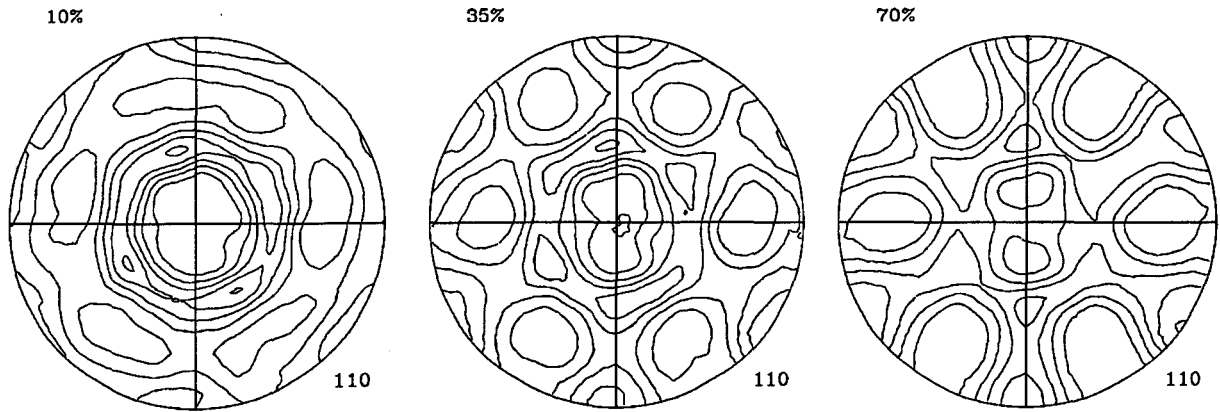


Figure IV.26 : Evolution de la texture en fonction de l'amplitude de déformation pour le laminage.

IV.5.3 - Comparaisons avec des données expérimentales

Dans ce chapitre, nous avons vu que l'évolution de la surface de plasticité est un phénomène complexe, et ne peut, par conséquent, être caractérisée de façon acceptable par des modèles simples. Les figures IV.27 à IV.31 représentent l'évolution de la surface de plasticité d'un aluminium pour différents trajets de chargement. Une comparaison est faite entre les résultats obtenus à l'aide de notre modèle et ceux issus d'essais expérimentaux réalisés par Bui (1964) et Boucher et *al.* (1992). Ces figures présentent les surfaces de plasticité avant et après prédéformation, avec la figure IV.31 qui concerne un chargement complexe. On constate que le modèle proposé permet d'obtenir une surface de plasticité après prédéformation en bonne corrélation avec les résultats expérimentaux.

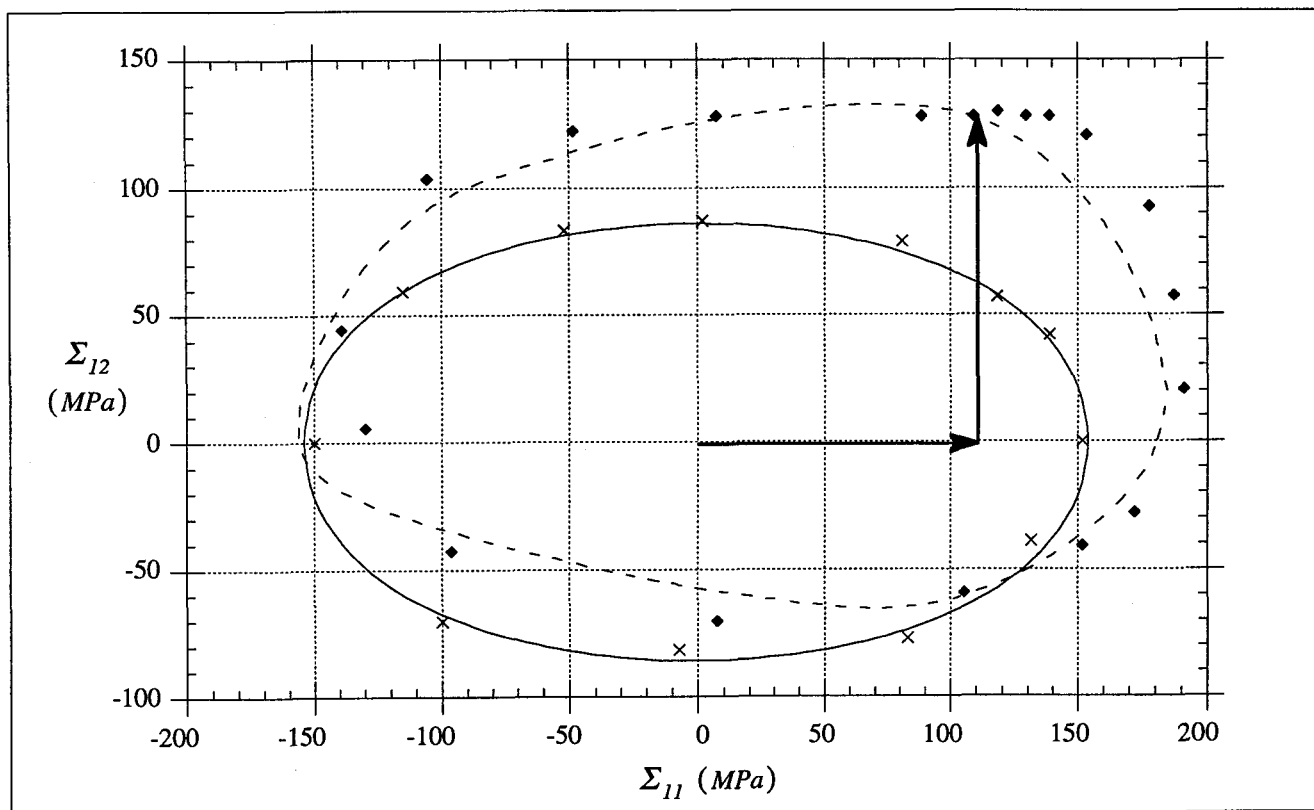


Figure IV.27 : Comparaison de l'évolution de la surface de plasticité d'un aluminium obtenue à l'aide du modèle proposé avec des résultats expérimentaux, Bui (1964).

Avant prédéformation Après prédéformation
 ——— Surface calculée - - -
 x Surface expérimentale ♦

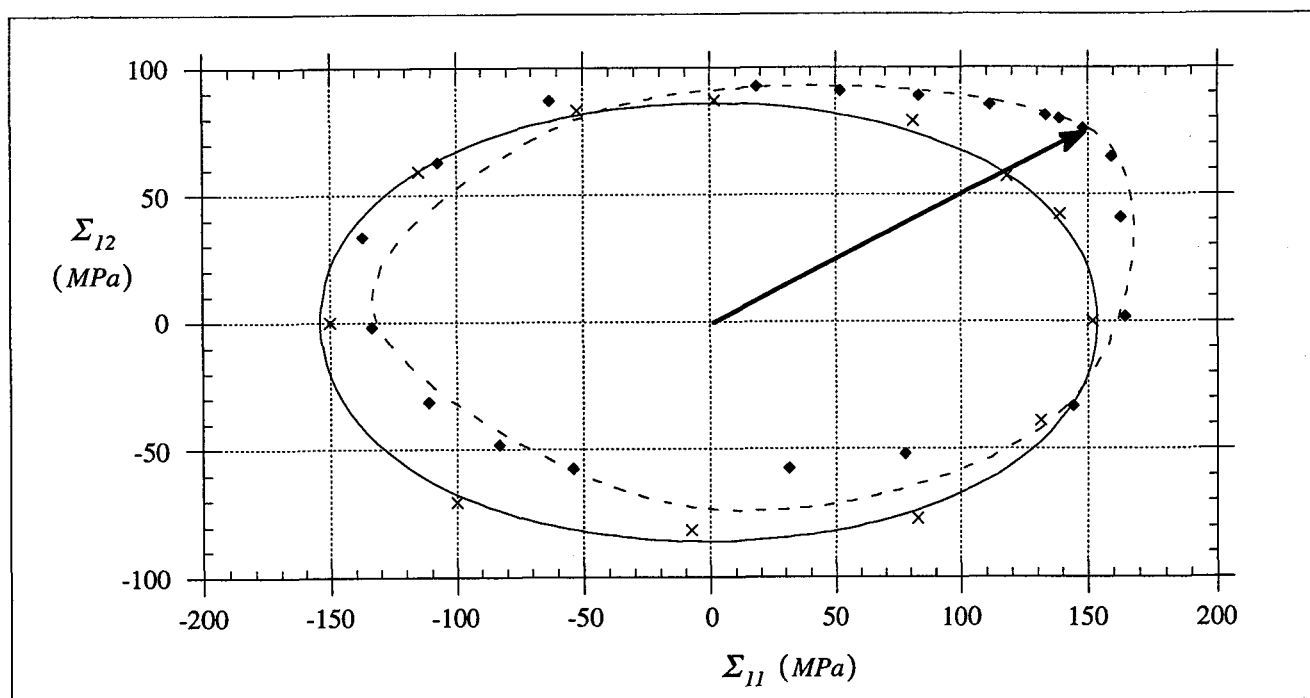


Figure IV.28 : Comparaison de l'évolution de la surface de plasticité d'un aluminium obtenue à l'aide du modèle proposé avec des résultats expérimentaux, Bui (1964).

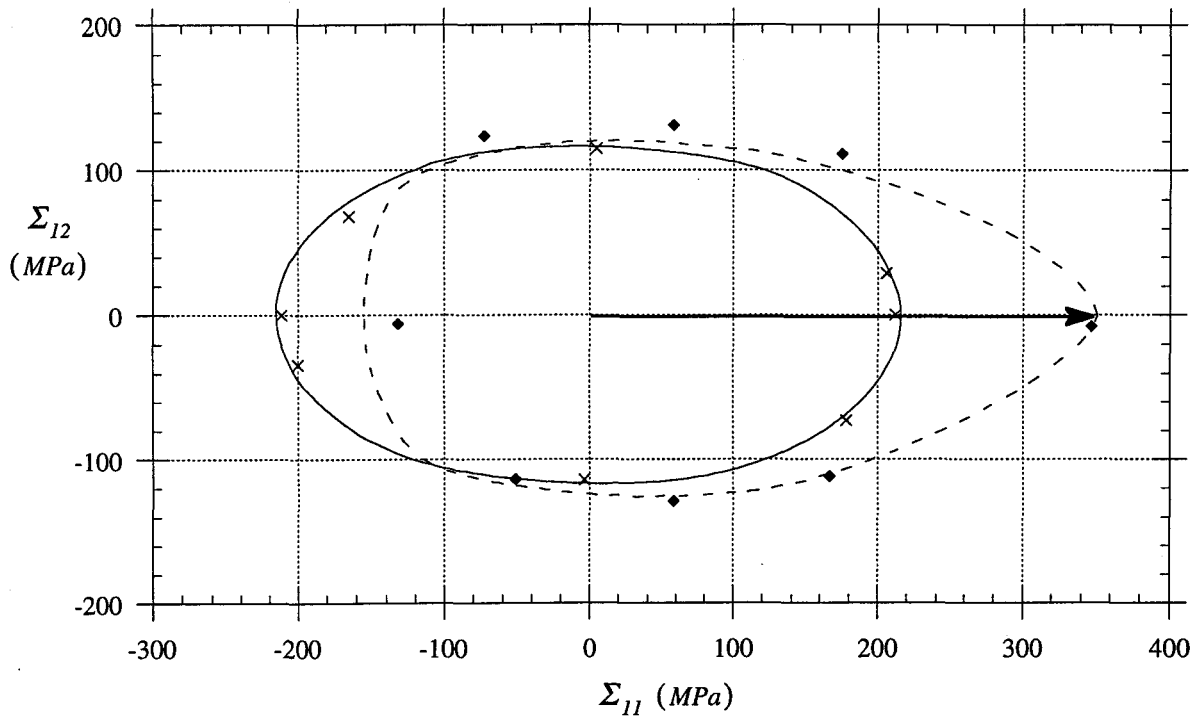


Figure IV.29 : Comparaison de l'évolution de la surface de plasticité d'un aluminium obtenue à l'aide du modèle proposé avec des résultats expérimentaux, Boucher et al. (1992).

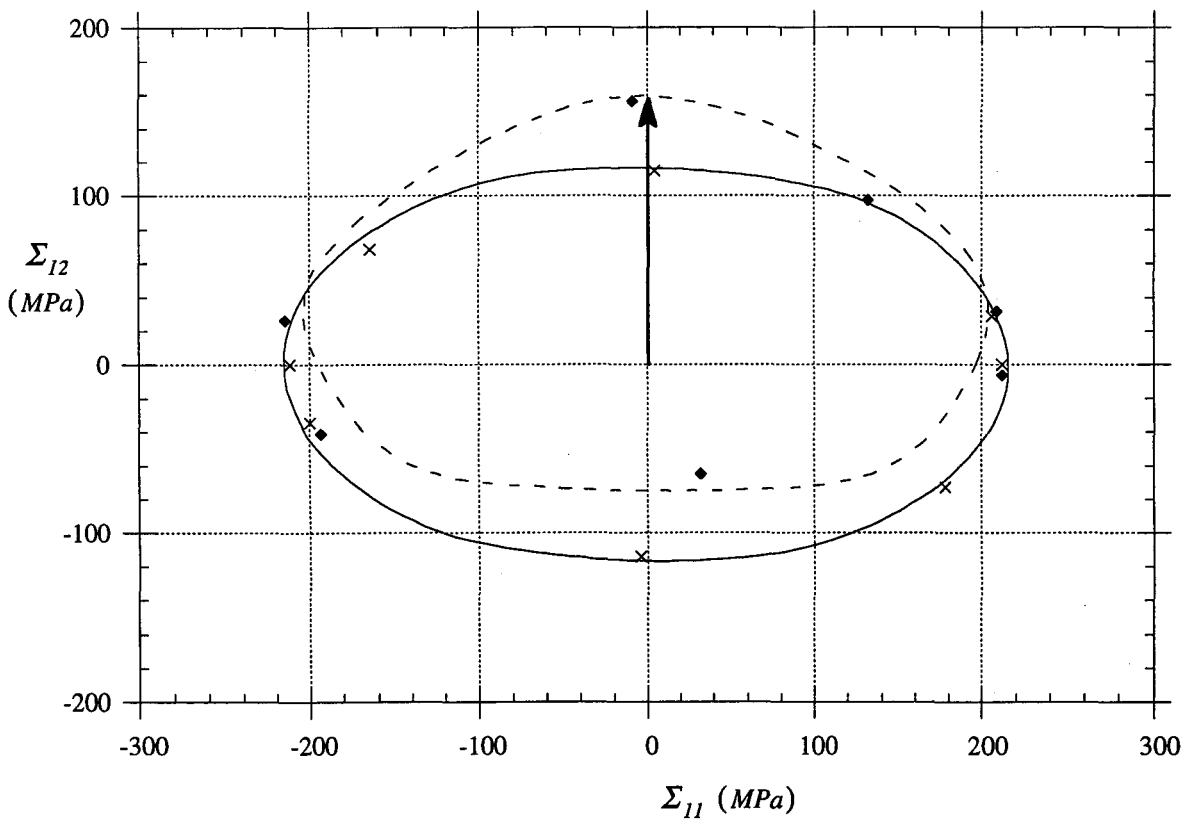


Figure IV.30 : Comparaison de l'évolution de la surface de plasticité d'un aluminium obtenue à l'aide du modèle proposé avec des résultats expérimentaux, Boucher et al. (1992).

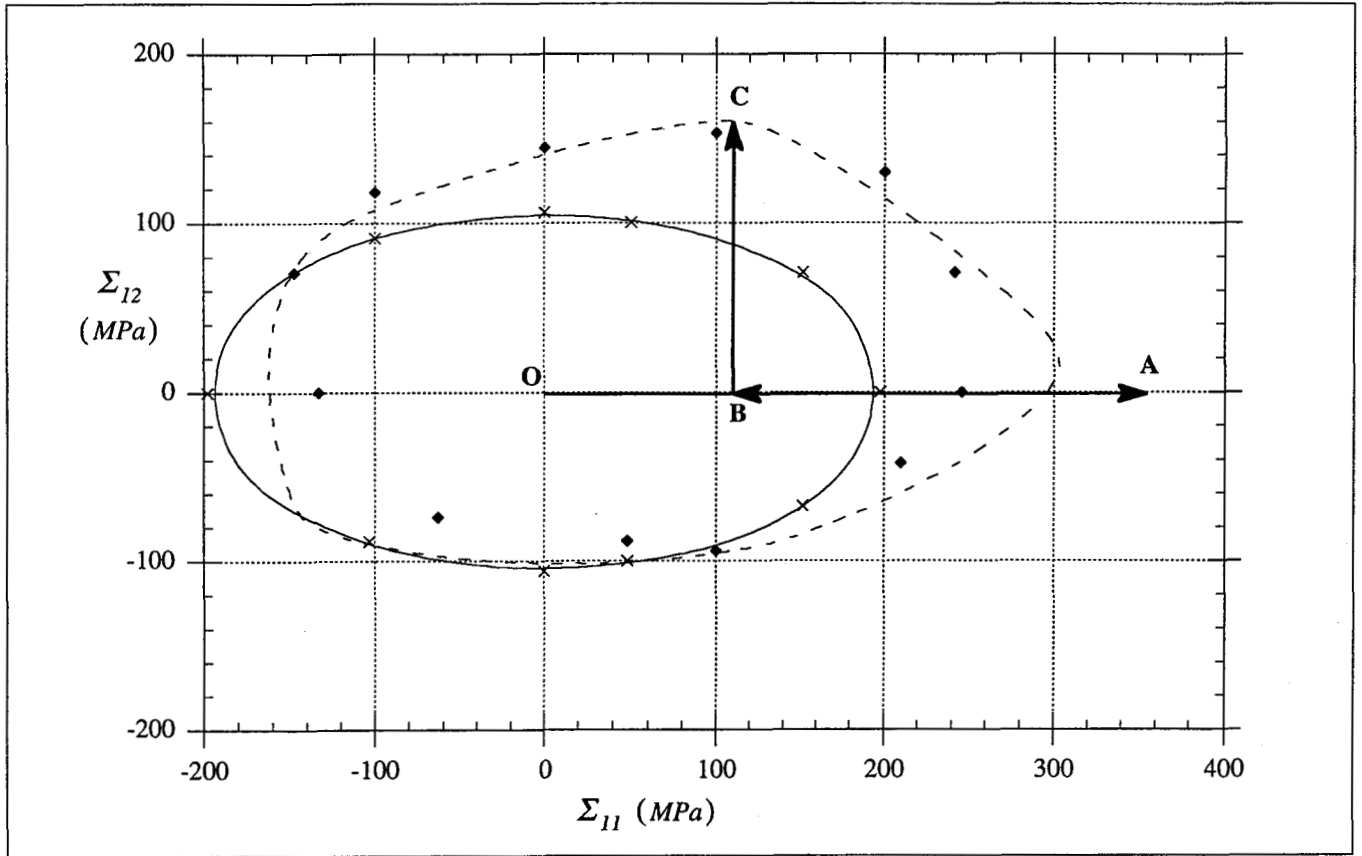


Figure IV.31 : Comparaison de l'évolution de la surface de plasticité d'un aluminium obtenue à l'aide du modèle proposé avec des résultats expérimentaux, Boucher et al. (1992). Cas d'un chargement complexe O-A-B-C.

IV.6 - Conclusions

Dans ce travail, on a vu que l'amélioration du calcul numérique de T^{II} et T^{IJ} , ainsi que le changement du critère de sélection des systèmes actifs, a permis d'aboutir à l'élaboration d'un algorithme efficace, en terme de vitesse d'exécution et de précision des résultats.

La détermination des tenseurs d'interaction T^{II} et T^{IJ} est essentielle dans la méthode autocohérente. En particulier, en ce qui concerne la modélisation du comportement élastique des composites ordonnés, où le schéma autocohérent à sites multiples y trouve tout son intérêt. Pour un polycristal, on peut faire l'hypothèse qu'il soit constitué de grains sphériques situés dans un milieu

isotrope, étant donné que les réseaux cristallographiques sont pris initialement de façon aléatoire. Néanmoins, lors de la déformation élastoplastique, la rotation de ces réseaux suivant une direction privilégiée entraîne une anisotropie macroscopique. On voit donc l'importance d'effectuer le calcul numérique du tenseurs d'interaction T^{II} par une démarche générale. Le phénomène est amplifié lorsque l'on se place dans le cadre des grandes transformations, pour lesquelles la morphologie des grains est amenée à évoluer.

La mise en place d'un nouveau critère de sélection des systèmes de glissement actifs, a alors achevé la construction du modèle. Dans le chapitre V, nous présentons la technique du couplage de ce modèle avec un code d'éléments finis que nous avons développé. Comme nous l'avons vu, l'utilisation d'une approche cristallographique permet de rendre compte des effets des phénomènes microstructuraux sur le comportement macroscopique. L'apport bénéfique, par rapport à un modèle phénoménologique, pour les simulations de chargements complexes se trouve alors transposé au niveau du couplage. L'amélioration réalisée sur la vitesse d'exécution de l'algorithme rend ce genre de couplage moins dérisoire, même si le temps de calcul reste un inconvénient majeur. Ce problème peut alors être partiellement résolu par la réalisation d'un couplage mixte exposé au chapitre suivant.

Références bibliographiques

- Baczanski, A., Lipinski, P., Wierzbowski, K., Zattarin, P., (1998), soumise à *Mechanics of Materials*.
- Begis, D., Bestagno, A., Duvaut, G., Hassim, A., Nuc, M., (1983), rapport de recherche INRIA.
- Boucher, M., Cayla, P., Cordebois, J., P., MECAMAT '92 International Seminar on Multiaxial Plasticity, LMT-Cachan, France, pp. 300-320.
- Brockenbrough, J., R., Wienecke, H., A., Romanko, A., D., (1992), A unit cell model of a particulate composite.
- Broohm, A., Lipinski, P., Zattarin, P., (1998), soumise à *Archiv of Mechanics*.
- Bui, H., D., (1964), *C. R. Acad. Sc. Paris*, 259, pp. 4509-4512.
- Carmasol, A., Lipinski, P., (1995), 2^{ème} Congrès Marocain de Mécanique, Maroc, pp. 307-312.
- Dawson, P., Beaudouin, A., Mathur, K., Sarma, G., (1994), *Revue européenne des éléments finis*, Vol. 3, n° 4, pp. 543-571.
- Fassi-Fehri, O., (1985), Thèse, Université de Metz.
- Hihi, A., Fassi-Fehri, O., Berveiller, M., (1987), *Int. J. Engng Sci.*, 25, p. 691.
- Hill, R., (1966), *J. Mech. Phys. Solids*, 14, pp. 95-102.
- Hill, R., Rice, J., R., (1972), *J. Mech. Phys. Solids*, 20, pp. 401-413.
- Kneer, G., (1965), *Physica Status Solidi*, 2, p. 825.
- Leffers, T., (1968), *Phys. Stat. Sol.*, 25, p. 337.
- Lipinski, P., (1993), Thèse d'habilitation, Université de Metz.
- Mura, T., (1971), *J. Appl. Mech.*, 38, pp. 865-868.
- Ralston, A., (1965), *A First Course in Numerical Analysis*, Mc Graw-Hill.
- Rodin, G., J., (1993), *Int. J. Solids Structures*, pp. 1849-1863.
- Sangani, A., S., Lu, W., (1987), *J. Mech. Phys. Solids*, 35, pp. 1-21.
- Shiratori, Ikegami, Kaneko, (1977), *J.S.M.E.*, 20, pp. 1549-1556.
- Vieville, P., Lipinski, P., 9^{ème} Journées Nat. Composites, pp. 307-312.
- Wierzbowski, K., Jura, J., Haije, W., G., Helmholtz, R., B., (1992), *Cryst. Res. Technol.*, 27, p. 513.
- Zattarin, P., Lipinski, P., (1997), 13^{ème} Congrès de Mécanique, Poitiers, pp. 357-360.
- Zattarin, P., Carmasol, A., Lipinski, P., (1997^a), 3^{ème} Congrès Marocain de Mécanique, Tétouan, Maroc, pp. 845-850.
- Zattarin, P., Lipinski, P., Vieville, P., (1997^b), 3^{ème} Congrès Marocain de Mécanique, Tétouan, Maroc, pp. 839-844.



CHAPITRE V

INTEGRATION DU MODELE AUTOCOHERENT DANS UN CODE DE CALCUL DE STRUCTURES

Dans ce chapitre, on propose le couplage entre le modèle polycristallin élastoplastique, présenté dans les chapitres précédents, et un code d'éléments finis 3D que nous avons développé. Après avoir introduit le principe de la méthode des éléments finis, on s'intéresse à la technique d'implantation du modèle autocohérent dans ce code. On étudie alors la résolution de problèmes concrets réalisée à l'aide de ce couplage.

V.1 - Introduction

Les codes de calcul par éléments finis ont besoin, pour fonctionner, de lois de comportement du (des) matériau(x) composant la structure à étudier. Dans les chapitres précédents, nous avons vu qu'en élastoplasticité, elles peuvent se classer selon deux grandes familles. Pour la majorité des codes, ces lois sont construites à partir d'approches phénoménologiques, du fait que leur implantation soit relativement simple. Nous avons vu aussi que ces modèles peuvent s'avérer inadaptés à certain cas de chargement, en particulier lorsque que ce dernier nécessite de prendre en compte l'évolution de la microstructure du matériau qui se manifeste, entre autres, par une modification de la surface de plasticité. Dès lors, l'utilisation d'approches à transition d'échelle s'impose. Le développement notable des outils informatiques permet maintenant d'envisager l'introduction d'approches cristallographiques dans les codes d'éléments finis. On peut citer en exemple Dawson *et al.* (1994) qui utilisent une extension du modèle de Taylor, ou, dans un même ordre d'idées, Cailletaud & Pilvin (1994), ou bien encore Scacciatella (1994).

Dans le couplage que nous avons développé, on implante le modèle autocohérent exposé dans les chapitres III et IV. Malgré les améliorations apportées, un tel code reste encore lourd d'utilisation. Ici, nous proposons une démarche originale, qui consiste à créer un couplage mixte avec les deux approches présentées. Dans ce chapitre, on expose la procédure d'un tel couplage, ainsi que ses avantages, au travers d'exemples concrets.

V.2 - Démarche générale des éléments finis

V.2.1 - Introduction

La résolution de problèmes en mécanique des structures à l'aide des éléments finis, a été rendue possible, notamment, par l'utilisation du principe des travaux virtuels.

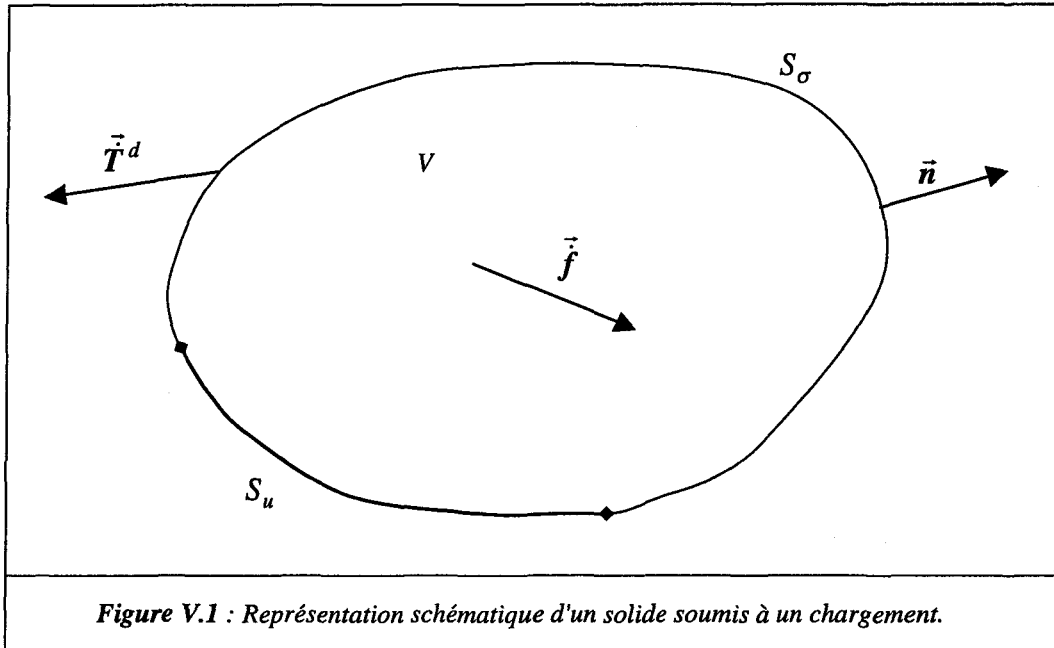
Il y a trois domaines principaux d'application de la méthode des éléments finis, Zienkiewicz (1971), Desai & Abel (1972), Norrie & de Vries (1973), Gallagher (1975), et qui sont :

- ◆ Les problèmes d'équilibres, dans lesquels il n'y a pas évolution des variables avec le temps. On peut citer, l'étude de systèmes linéaires ou non-linéaires, tels que l'analyse des contraintes en élasticité ou élastoplasticité, de problèmes électrostatiques ou de conduction thermique stabilisée, voir par exemple Zienkiewicz et *al.* (1972).
- ◆ Les problèmes de recherche de valeurs propres, qui sont une extension des problèmes d'équilibre, et pour lesquels on doit déterminer les valeurs spécifiques ou critiques de certains paramètres. La détermination des fréquences propres d'une structure élastique, dans les systèmes en vibration, en est un exemple, Anderson et *al.* (1968).
- ◆ Les problèmes de propagation, incluant ceux où il y a des variables dépendantes du temps. En exemple, l'analyse de la dynamique des milieux élastiques et de l'hydrodynamique sont de tels problèmes, Taylor & Davis (1975).

Dans ce travail, on limite notre étude à l'application de la méthode des éléments finis pour les problèmes d'équilibres, bien que le couplage proposé puisse également être utilisé en dynamique rapide des solides élastoplastiques. Notre but étant d'étudier le comportement élastoplastique d'une structure, et comme nous l'avons vu, il est nécessaire d'utiliser une procédure incrémentale. Par conséquent, on associe à chaque incrément, un état d'équilibre.

V.2.2 - Principe des puissances virtuelles

On considère un solide, ou une structure, soumis à un chargement quelconque, et schématisé sur la figure V.1 :



\vec{T}^d représente le vecteur taux des forces extérieures appliquées sur S_σ , \vec{f} est le vecteur taux des forces intérieures du volume V considéré, et S_u désigne la surface sur laquelle on impose le déplacement.

En supposant le problème quasi-statique, les équations d'équilibres s'écrivent :

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{ij} &= \dot{\sigma}_{ji} \\ \dot{\sigma}_{ij,j} + \dot{f}_i &= 0 \quad \text{dans } V \end{aligned} \quad (V.1)$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned} \dot{u}_i &= \dot{u}_i^d \quad \text{sur } S_u \\ \dot{\sigma}_{ij} n_j &= \dot{T}_i = \dot{T}_i^d \quad \text{sur } S_\sigma \end{aligned} \quad (V.2)$$

où \vec{u}^d est le vecteur taux de déplacement imposé, et \vec{n} représente la normale extérieure à S_σ .

Considérons maintenant un vecteur vitesse virtuel, noté $\delta\vec{u}$, cinématiquement admissible, c'est à dire que :

$$\delta\vec{u} = \vec{0} \quad \text{sur } S_u \quad (V.3)$$

Alors la puissance virtuelle associée aux forces extérieures \vec{T}^d imposées sur S_σ peut s'écrire d'une manière générale sur toute la surface extérieure S :

$$\int_{S_\sigma} \dot{T}_i^d \delta \dot{u}_i dS = \int_S \dot{T}_i \delta \dot{u}_i dS \quad (V.4)$$

En introduisant les conditions aux limites (V.2), et par application du théorème de la divergence, on obtient :

$$\int_{S_\sigma} \dot{T}_i^d \delta \dot{u}_i dS = \int_V \dot{\sigma}_{ij,j} \delta \dot{u}_i dV + \int_V \dot{\sigma}_{ij} \delta \dot{u}_{i,j} dV \quad (V.5)$$

On introduit dans cette équation le taux de déformation virtuelle associée à la vitesse virtuelle, et définit par :

$$\delta \dot{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} (\delta \dot{u}_{i,j} + \delta \dot{u}_{j,i}) \quad (V.6)$$

De plus, en prenant en compte les équations d'équilibre (V.1), alors la relation (V.5) permet d'exprimer le principe des puissances virtuelles, et s'écrit sous forme matricielle :

$$\int_V {}^t \{\delta \dot{\epsilon}\} \{\dot{\sigma}\} dV - \int_V {}^t \{\delta \dot{u}\} \{\dot{f}\} dV - \int_{S_\sigma} {}^t \{\delta \dot{u}\} \{\dot{T}^d\} dS = 0 \quad (V.7)$$

V.2.3 - Discrétisation par la méthode des éléments finis

La résolution de la relation (V.7) est obtenue en discrétisant le domaine en éléments finis. On utilise pour cela des éléments isoparamétriques, pour lesquels nous avons :

$$\{\delta \dot{u}^{(e)}\} = [n^{(e)}] \{\delta \dot{q}^{(e)}\} \quad (V.8)$$

$$\{\delta \dot{\epsilon}^{(e)}\} = [B^{(e)}] \{\delta \dot{q}^{(e)}\} \quad (V.9)$$

où $\dot{q}^{(e)}$ représente le vecteur vitesse aux nœuds de l'élément e , $n^{(e)}$ est la matrice des fonctions de formes et $B^{(e)}$ la matrice de déformations. L'expression de ces matrices peut être trouvée dans Owen & Hinton (1980) pour différents types d'éléments.

La relation (V.7) se réécrit pour l'élément e :

$$\int_{V^{(e)}} {}^t\{\delta\dot{q}^{(e)}\}{}^t[B^{(e)}]\{\dot{\sigma}^{(e)}\}dV^{(e)} - \int_{V^{(e)}} {}^t\{\delta\dot{q}^{(e)}\}{}^t[n^{(e)}]\{\dot{f}\}dV^{(e)} - \int_{S_g^{(e)}} {}^t\{\delta\dot{q}^{(e)}\}{}^t[n^{(e)}]\{\dot{T}^d\}dS^{(e)} = 0 \quad (V.10)$$

On introduit à présent le vecteur des forces nodales défini pour l'élément e par :

$$\{\dot{f}^{(e)}\} = \int_{V^{(e)}} {}^t[n^{(e)}]\{\dot{f}\}dV^{(e)} + \int_{S_g^{(e)}} {}^t[n^{(e)}]\{\dot{T}^d\}dS^{(e)} \quad (V.11)$$

Le principe des puissances virtuelles doit être vérifié quelque soit $\delta\dot{q}$ cinématiquement admissible, l'équation (V.10) devient alors :

$$\int_{V^{(e)}} {}^t[B^{(e)}]\{\dot{\sigma}^{(e)}\}dV^{(e)} - \{\dot{f}^{(e)}\} = 0 \quad (V.12)$$

Le chargement imposé à la structure permet d'établir le vecteur taux des forces nodales $\dot{f}^{(e)}$. On détermine par conséquent le comportement de l'élément à partir de cette équation, dans laquelle il est nécessaire de considérer la loi élastoplastique :

$$\{\dot{\sigma}^{(e)}\} = [L^{(e)}]\{\dot{\epsilon}^{(e)}\} \quad (V.13)$$

avec la matrice $L^{(e)}$ des modules tangents que l'on peut déterminer soit par une approche phénoménologique (chapitre II), soit par une approche cristallographique (chapitres III et IV). La vitesse de déformation $\dot{\epsilon}^{(e)}$ se calcule à partir du taux de déplacement nodal, par l'intermédiaire de l'expression (V.9). La relation (V.12) devient alors :

$$\int_{V^{(e)}} {}^t[B^{(e)}][L^{(e)}][B^{(e)}]\{\dot{q}^{(e)}\}dV^{(e)} - \{\dot{f}^{(e)}\} = 0 \quad (V.14)$$

Soit $k^{(e)}$ la matrice tangente de rigidité de l'élément e , définie par :

$$[k^{(e)}] = \int_{V^{(e)}} {}^t[B^{(e)}][L^{(e)}][B^{(e)}]dV^{(e)} \quad (V.15)$$

On a, finalement, l'équation (V.14), exprimant l'équilibre d'un élément, qui se réécrit :

$$[k^{(e)}]\{\dot{q}^{(e)}\} - \{\dot{f}^{(e)}\} = 0 \quad (V.16)$$

La mise en place de cette relation pour tous les éléments e conduit au système d'équations (V.17). En effet, du fait de la compatibilité des déplacements des nœuds communs à plusieurs éléments, les équations (V.16) sont interdépendantes. Leur assemblage conduit à une équation d'équilibre de la structure :

$$[K]\{\dot{Q}\} = \{\dot{F}\} \quad (V.17)$$

où $\{\dot{Q}\}$ caractérise le vecteur taux de déplacement nodal pour l'ensemble de la structure, $\{\dot{F}\}$ définit le vecteur taux des forces nodales et $[K]$ représente la matrice tangente de rigidité globale déterminée, comme nous l'avons souligné plus haut, par un assemblage des matrices de rigidité de tous les éléments.

De plus, le problème est non-linéaire, puisque d'après (V.15), la matrice $k^{(e)}$ est obtenue à partir de la connaissance des modules tangents $L^{(e)}$ dépendants de l'histoire de déformation de l'élément, et donc par (V.9), des déplacements nodaux. L'influence de l'histoire du chargement sur le comportement de la structure se reflète dans le caractère incrémental (en vitesse ou taux des variables) de la relation (V.17).

Dans le cadre d'une approche numérique, l'évolution des variables s'exprime sous forme d'incrément finis, au travers des équations (V.13), (V.16) et (V.17) qui peuvent se réécrire :

$$\{\Delta\sigma^{(e)}\} = [L^{(e)}]\{\Delta\varepsilon^{(e)}\} \quad (V.18)$$

$$[k^{(e)}]\{\Delta q^{(e)}\} = \{\Delta f^{(e)}\} \quad (V.19)$$

En raison de son caractère non-linéaire, l'équation d'équilibre globale (V.17) ne peut être satisfaite complètement. On introduit alors un vecteur de forces résiduelles, noté Ψ , et défini par :

$$\{\Delta\Psi\} = [K]\{\Delta Q\} - \{\Delta F\} \neq \{0\} \quad (V.20)$$

Il existe différentes méthodes de résolution d'un tel système dont le but est de faire tendre vers zéro les forces résiduelles Ψ , voir par exemple Owen & Hinton (1980). Ce problème constitue à lui seul un sujet de recherche en méthode numérique, et ne sera pas abordé ici. Dans ce travail, nous utilisons l'algorithme classique de Newton-Raphson garantissant une convergence quadratique.

A partir des travaux de Owen & Hinton (1980), Duchanois *et al.* (1992) ont développé un code d'éléments finis en élastoplasticité. Adapté à des structures 2D, il utilise uniquement des lois de comportement phénoménologiques isotropes.

Dans un premier temps, notre travail consiste à élargir les capacités du code au traitement des structures 3D volumiques. Deux types d'éléments isoparamétriques ont été intégrés dans ce code, à savoir :

- Un élément hexaédrique tri-linéaire à 8 nœuds
- Un élément hexaédrique quadratique à 20 nœuds

Différentes vérifications ont été effectuées pour valider les modifications apportées à ce code. Il a notamment été utilisé par Lipinski *et al.* (1996), pour calculer les contraintes résiduelles dans un réservoir sous pression, au voisinage d'une soudure (après un traitement thermique local de détensionnement).

Au vu des équations présentées ci-dessus, on constate que seul le calcul de la matrice de rigidité, par la relation (V.15), utilise la loi de comportement du matériau. C'est donc à cet endroit que l'on intègre le schéma autocohérent. Le moteur du code (solveur des équations non-linéaires) n'est pas affecté par l'intégration du modèle. Dans le paragraphe suivant, nous présentons trois différents couplages de la méthode autocohérente avec la méthode des éléments finis. La discussion est à chaque fois accompagnée de résolutions de problèmes réalisées à l'aide du code proposé.

V.3 – Implantation du modèle autocohérent dans la méthode des éléments finis

V.3.1 - Introduction

D'après la relation (V.15), le calcul de la matrice de rigidité $k^{(e)}$ passe par la détermination d'une intégrale sur tout le volume $V^{(e)}$ de l'élément e . A l'exception de quelques cas en élasticité linéaire, cette intégration doit nécessairement être effectuée par une méthode numérique. Comme dans la majorité des codes d'éléments finis, on utilise ici la méthode de Gauss, présentée dans le chapitre IV. Bien sur, le nombre de point de Gauss utilisé dépend du type d'élément utilisé (linéaire, quadratique, etc.). Pour les deux éléments considérés dans notre programme, il est recommandé d'utiliser :

- 2 points de Gauss par variable d'intégration (x , y et z) pour un élément hexaédrique à 8 nœuds, soit 8 ($= 2^3$) points de Gauss par élément.
- 3 points de Gauss pour un élément à 20 nœuds, soit 27 points de Gauss par élément.

Dans l'équation (V.15), la matrice de rigidité peut donc être approchée par :

$$[k^{(e)}] \approx \sum_{i=1}^{N_g} \sum_{j=1}^{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} w_i w_j w_k {}^t [B^{(e)}(x_i, y_j, z_k)] [L^{(e)}(x_i, y_j, z_k)] [B^{(e)}(x_i, y_j, z_k)] \quad (V.21)$$

où, on rappelle que w_i sont les poids, x_i, y_i, z_i les positions des points d'intégrations, et N_g correspond au nombre de points de Gauss par variable.

On remarque que dans l'utilisation de la méthode des éléments finis, il suffit de connaître la valeur des grandeurs physiques telles que les tenseurs (taux) de déformations, de contraintes et les modules tangents, uniquement aux points de Gauss. Il apparaît alors naturel de vouloir implanter le calcul autocohérent au niveau des points de Gauss du maillage. Cette approche a déjà été utilisée par Scacciatella et *al.* (1991). Elle consiste à créer pour chaque point d'intégration, un volume représentatif constitué d'un nombre de grains donné suffisant pour décrire l'anisotropie du matériau. Les essais entrepris par Scacciatella et *al.* (1992) dans le cas de problèmes 2D ont montré la faisabilité d'une telle approche, même si le nombre de grains (= 25) utilisé par point d'intégration a été très limité.

Comme nous le verrons, cette méthode est consommatrice de temps, ainsi que de place mémoire sur le disque dur. En effet, lors de la mise en œuvre du couplage 3D, pour un grain du polycristal, il est nécessaire de stocker, pour chaque état d'équilibre, les données suivantes :

- ❖ 6 paramètres décrivant sa forme (a, b et c), et son orientation (3 angles d'Euler α, β, γ).
- ❖ 3 angles d'Euler définissant l'orientation de son réseau cristallographique ($\varphi_1, \Phi, \varphi_2$).
- ❖ 12 cisssions critiques τ_{cr}^g pour un CFC, et 24 pour un CC.
- ❖ 6 composantes du tenseur des contraintes (σ_{ij}).
- ❖ Si on souhaite décrire l'écrouissage non-linéaire du monocristal, il faut en plus stocker les 24 (ou 48) glissements cumulés γ^g .

En résumé, nous devons stocker par grain :

- ◆ Pour un monocristal CFC : 27 réels \Rightarrow 216 octets (écrouissage linéaire).
51 réels \Rightarrow 408 octets (écrouissage non-linéaire).
- ◆ Pour un monocristal CC : 39 réels \Rightarrow 312 octets (écrouissage linéaire).
87 réels \Rightarrow 696 octets (écrouissage non-linéaire).

Une simulation avec 100 grains, dans le cas d'un écrouissage linéaire étudié ici, a besoin pour chaque point d'intégration, de 21.6 Ko (ou 31.2 Ko) de place mémoire sur le disque, soit :

- 172.8 (ou 249.6) Ko pour un élément à 8 points de Gauss.
- 583.2 (ou 842.4) Ko pour un élément à 27 points de Gauss.

On voit le problème de stockage qui se pose lorsque le nombre d'éléments est élevé (ce qui est généralement le cas pour des structures 3D). Il est donc important d'avoir une écriture optimisée et réfléchie du code de calculs utilisant l'approche autocohérente.

Comme nous l'avons vu, en élastoplasticité, lors de la mise en place de la méthode des éléments finis, il est nécessaire de procéder de façon incrémentale. Nous présentons ici l'algorithme de résolution permettant ainsi de mettre en évidence le couplage proposé. L'organigramme de ce schéma de résolution est donné sur la *figure V.2*, et commenté ci-dessous.

On suppose que la solution du problème est connue à l'incrément de chargement i .

- A l'incrément $i+1$, les forces nodales sont augmentées de $\{\Delta F\}_{i+1}$. La matrice de rigidité globale est déterminée à partir du module élastoplastique de l'incrément précédent, c'est à dire que l'on a :

$$[K]_{i+1} = [K]_i \quad (V.22)$$

- On détermine l'incrément de déplacement nodal pour l'ensemble de la structure, en inversant le système linéarisé (V.17).
- On connaît, par conséquent, le vecteur incrément de déplacement nodal pour chaque élément e du maillage. Par la relation (V.9), on peut alors calculer les vecteurs incrément de déformation totale et de rotation, pour tous les points d'intégration de l'élément e , ou plus généralement, l'incrément du gradient de transformation.
- Ce gradient constitue, à chaque point de Gauss, le chargement macroscopique d'un volume élémentaire représentatif du matériau. Le traitement autocohérent permet donc de déterminer, à chaque point d'intégration :

- ❖ L'incrément de contrainte macroscopique $\{\Delta \sigma^{(e)}\}_{i+1}$.
- ❖ Les modules tangents élastoplastiques $[L^{(e)}]_{i+1}$.

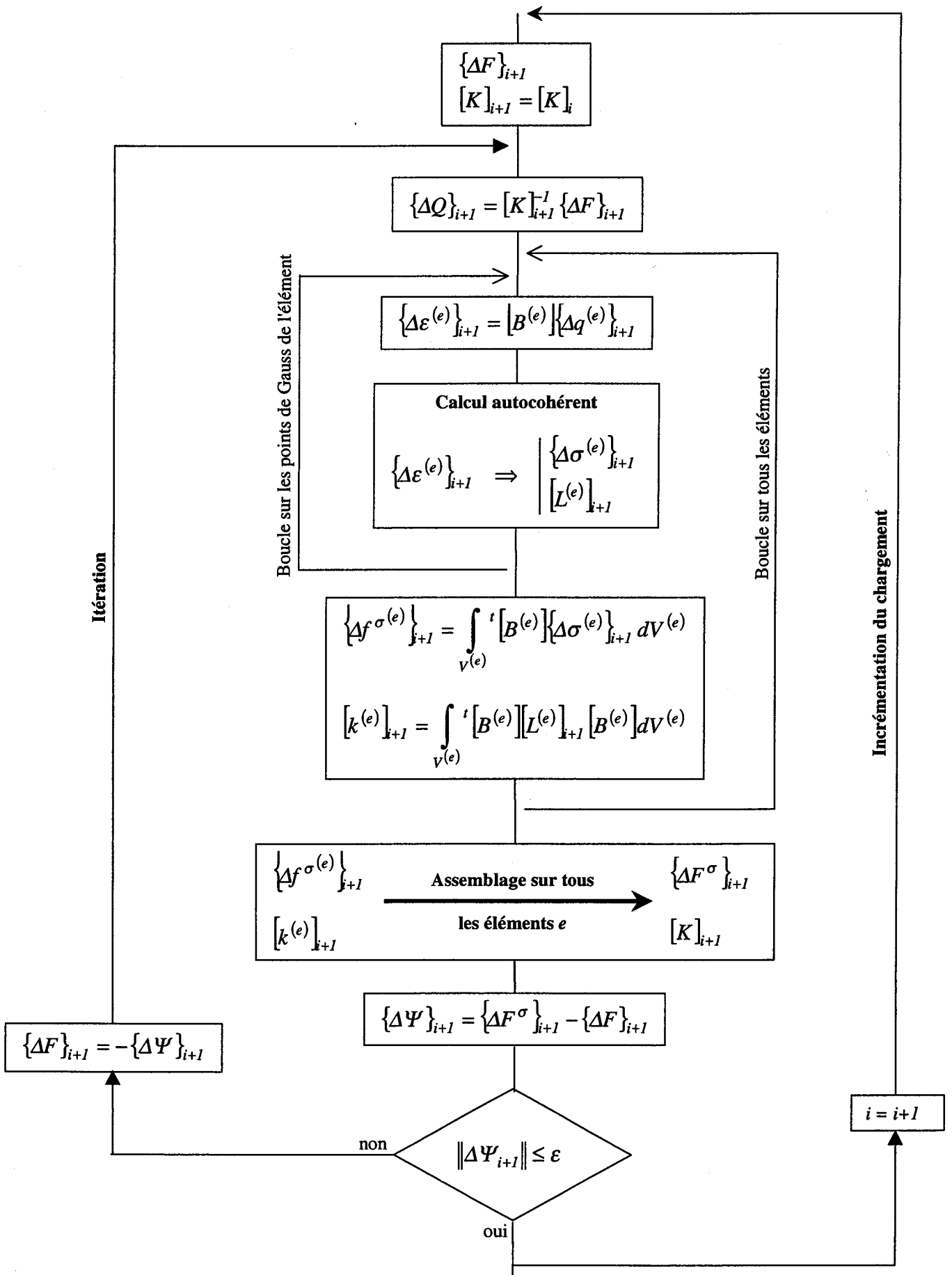


Figure V.2 : Organigramme de résolution par la méthode des éléments finis.

- Les équations (V.12) et (V.15), par l'intégration sur tout le volume de l'élément e , nous donnent alors :
 - ❖ L'incrément des forces $\{\Delta f^{\sigma(e)}\}_{i+1}$ dans tout l'élément e , associé à l'incrément de contrainte.
 - ❖ La matrice de rigidité $[k^{(e)}]_{i+1}$ de l'élément e .
- L'assemblage sur tout les éléments e du maillage permet de déterminer :
 - ❖ L'incrément des forces nodales $\{\Delta F^{\sigma}\}_{i+1}$, associées à l'état de contrainte dans la structure.
 - ❖ Une nouvelle approximation de la matrice de rigidité globale $[K]_{i+1}$, pour l'incrément $i+1$.
- La détermination de la matrice des forces résiduelles, au travers du calcul de sa norme, permet de vérifier le critère de convergence. On s'assure ici que la différence entre les forces nodales associées à l'état de contraintes calculées dans toute la structure, et les forces nodales imposées en début de l'incrément ne dépasse pas une tolérance ϵ admise.
- Si le critère de convergence n'est pas vérifié, on impose alors à la structure des forces nodales qui permettent de corriger la valeur trop élevée de la norme des forces résiduelles, c'est à dire telles que :

$$\{\Delta F\}_{i+1} = -\{\Delta \Psi\}_{i+1} \quad (\text{V.23})$$

A chaque itération, on stocke sur le disque le nouvel état du polycristal, faisant ainsi évoluer la microstructure.

Dans le code développé, nous avons imaginé et implanté trois différentes méthodes de couplage.

La première est un couplage complet, qui consiste à définir tous les éléments du maillage en calcul autocohérent. Elle trouve son application pour les problèmes où la plastification de la structure est généralisée, comme par exemple lors de la simulation du formage d'une pièce.

Dans la deuxième méthode, qui demande une certaine intuition, l'utilisateur prédéfinit a priori une partie du maillage en éléments "autocohérents". Dans ce couplage mixte, les éléments qui ne se plastifient pas, sont associés à une loi phénoménologique, donc son utilisation reste limitée à des problèmes de plasticité confinée, où les zones plastifiées sont facilement identifiables.

La troisième méthode est réalisée selon une démarche adaptative. Initialement tous les éléments sont liés à une loi de comportement phénoménologique. En cours de chargement, les points de Gauss susceptibles de se plastifier (en vérifiant le critère de Tresca) passent en calcul autocohérent. Les étiquettes associées aux lois de comportement ne sont plus, dans ce cas, attribuées aux éléments, mais sont affectées aux différents points d'intégration.

Dans la suite de ce chapitre, nous discutons de ces méthodes pour des géométries de plus en plus complexes et comportant un nombre de degrés de liberté croissant.

Le premier problème est trivial, il s'agit d'une barre à section carrée soumise à un chargement en traction monotone uniaxiale, pour laquelle la déformation est homogène dans toute la structure. Le but de cette étude est de vérifier, par rapport à une solution analytique, l'exactitude de la solution numérique, ainsi que d'analyser l'importance du nombre de grains considérés sur la précision des résultats, sur les temps de calcul et la place mémoire nécessaire.

V.3.2 – Couplage complet, essai de traction monotone

Pour ce couplage, le plus simple à mettre en œuvre, tous les éléments du maillage sont traités par un calcul autocohérent, comme cela est représenté sur l'organigramme de la *figure V.2*.

La lecture des données par le code à une architecture typique de la méthode des éléments finis. Après la saisie des coordonnées des nœuds, des liaisons entre les éléments, des propriétés élastiques du (des) matériau(x), et des conditions aux limites, le logiciel crée un fichier contenant les informations relatives à la microstructure. Le numéro d'enregistrement des données (I_{rec}) est défini à partir du numéro de l'élément (I_{elem}), du point de Gauss (I_{gauss}) et du grain (I_{grain}) constituant le polycristal :

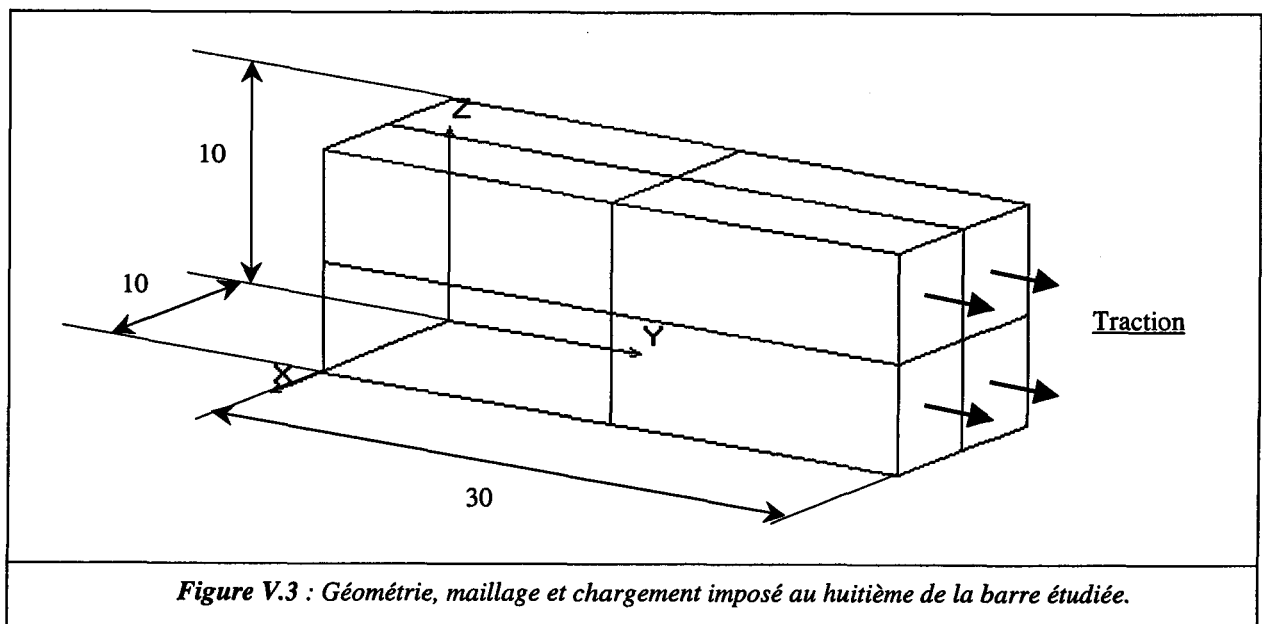
$$I_{rec} = (I_{elem} - 1) \times N_{gauss} \times N_{grain} + (I_{gauss} - 1) \times N_{grain} + I_{grain} \quad (V.24)$$

où N_{grain} est le nombre de grains dans chaque polycristal, et $N_{gauss} = N_g \times N_g \times N_g$ représente le nombre de points d'intégration par élément. Pour le numéro d'enregistrement défini par (V.24), on stocke toutes les données relatives au monocristal considéré. Comme cela a été exposé plus haut,

la longueur de l'enregistrement (la place mémoire allouée) pour chaque grain dépend du type de monocristal (type de réseau cristallographique), ainsi que de l'écroissage choisi.

Bien sur, le fichier de données dépend de l'état initial de la matière. Si chaque volume représentatif est supposé isotrope et sans contraintes internes, les orientations cristallographiques des grains sont générées aléatoirement, et une seule série peut être utilisée pour l'ensemble de la structure. Il est possible aussi de définir une structure interne particulière, par exemple une texture issue d'une simulation autocohérente de laminage, et d'imposer celle-ci en tant qu'état initial de la matière. Cet état peut également être différent d'un endroit à l'autre de la structure étudiée. On voit donc que l'on dispose d'une liberté totale en ce qui concerne l'état microstructural initial associé à chaque élément.

La mise en place de cette version du couplage a été testée sur une structure de géométrie élémentaire. Il s'agit d'une barre à section carrée, chargée par une force imposée (sous forme d'une pression) à ces extrémités. La prise en compte des 3 plans de symétrie du problème a permis de modéliser uniquement 1/8 de la structure. Cette symétrie, par rapport aux plans (O, \bar{x}, \bar{y}) , (O, \bar{y}, \bar{z}) et (O, \bar{z}, \bar{x}) , est prise en compte par les conditions aux limites, en imposant des déplacements nuls suivant la direction de la normale, respectivement à chaque plan de symétrie, des nœuds du maillage appartenant à ce plan. Cette géométrie est discrétisée en 8 éléments isoparamétriques à 20 nœuds. Les dimensions (en *mm*) et le maillage du huitième de la barre est représenté sur la *figure V.3*.



Le matériau est supposé initialement isotrope, avec les propriétés élastiques suivantes

- Module de cisaillement : $\mu = 80000 \text{ MPa}$.
- Coefficient de Poisson : $\nu = 0.3$.

La microstructure est composée de grains (supposés sphériques), dont le réseau cristallographique est CC, avec une cission critique initiale identique pour tous les systèmes de glissements :

$$\tau_{cr}^g = 100 \text{ Mpa} \quad g = 1, \dots, 24 \quad (\text{V.25})$$

Cet exemple est destiné à montrer l'influence du nombre de grains que l'on considère à chaque point de Gauss. Les résultats sont comparés à ceux issus d'une simulation par éléments finis utilisant une loi phénoménologique à écrouissage isotrope. C'est pourquoi, il a été nécessaire de caler les différentes lois de chaque modèle, et pouvoir ainsi effectuer les comparaisons. Le code éléments finis (couplé à la loi phénoménologique) permet de linéariser la loi de comportement à partir de valeurs prédéfinies. Ainsi, nous avons effectué une simulation autocohérente, avec un nombre de grains élevé (10 000) d'un essai de traction et répertorié les points caractéristiques de la courbe, voir *figure V.4*, qui seront utilisés par les lois phénoménologiques.

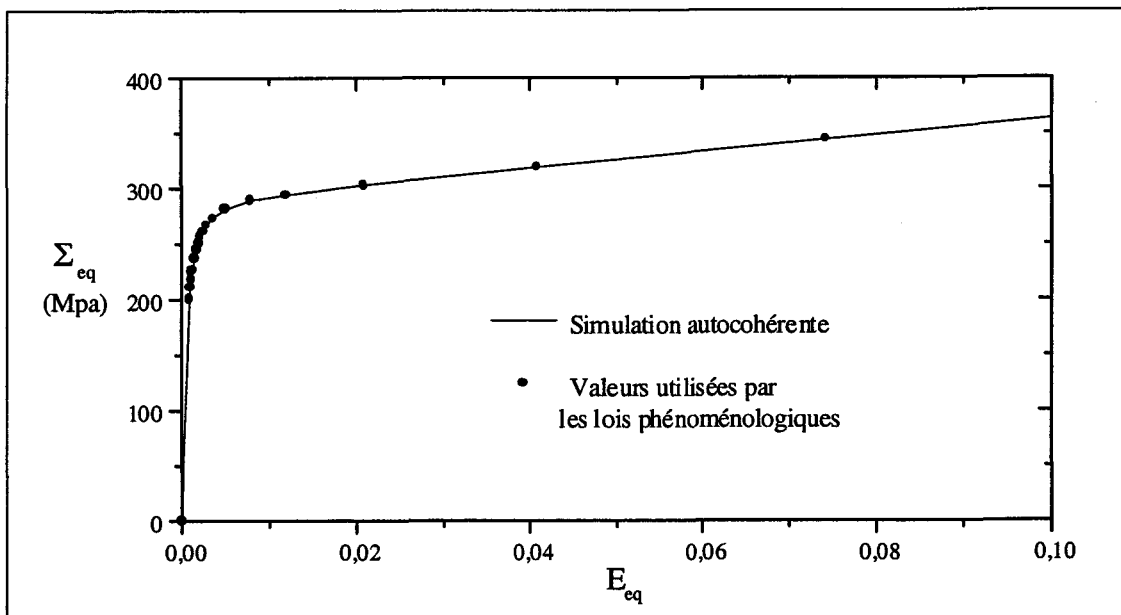
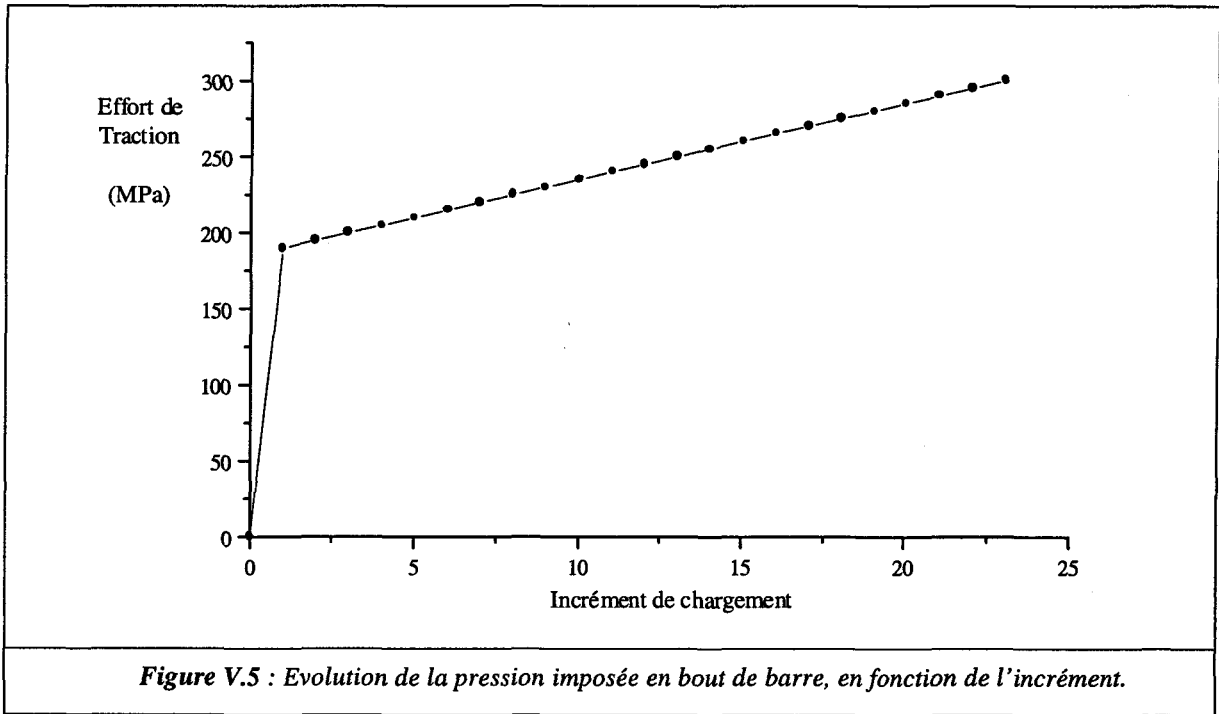


Figure V.4 : Identification des points issus d'une simulation autocohérente qui seront utilisés par la loi phénoménologique.

Comme nous l'avons indiqué précédemment, dans la méthode des éléments finis en élastoplasticité, le chargement doit être effectué de façon incrémental. Sur la *figure V.5*, on a représenté la valeur de la pression imposée à l'extrémité de la barre en fonction du numéro de l'incrément. Lors du premier incrément, on charge l'éprouvette uniquement dans le domaine élastique.



Le nombre de grains considérés par point de Gauss, pour les différentes simulations réalisées à l'aide du couplage avec la méthode autocohérente, est respectivement de 25, 50, 100 et 200. Dans un premier temps, nous avons considéré, à chaque fois, les mêmes séries d'orientations cristallographiques (aléatoires) pour tous les points de Gauss de la structure. Sur la *figure V.6*, on compare alors la réponse élastoplastique d'un point de Gauss, sur laquelle est aussi représentée la simulation obtenue par la méthode des éléments finis avec la loi de comportement phénoménologique. Lors de l'utilisation du couplage avec le schéma autocohérent, on constate que les différences entre les courbes diminuent pour un nombre de grains considérés croissant. On note également que le choix d'un agrégat de 100 grains par point de Gauss semble constitué un bon compromis entre la précision de calcul, le temps d'exécution (présenté plus loin) et la taille des fichiers de stockage des données de la microstructure, qui dans ce cas, est de 31.2 Ko par point d'intégration. Ce choix d'un polycristal comprenant 100 grains est à rapprocher de celui effectué dans le chapitre IV.

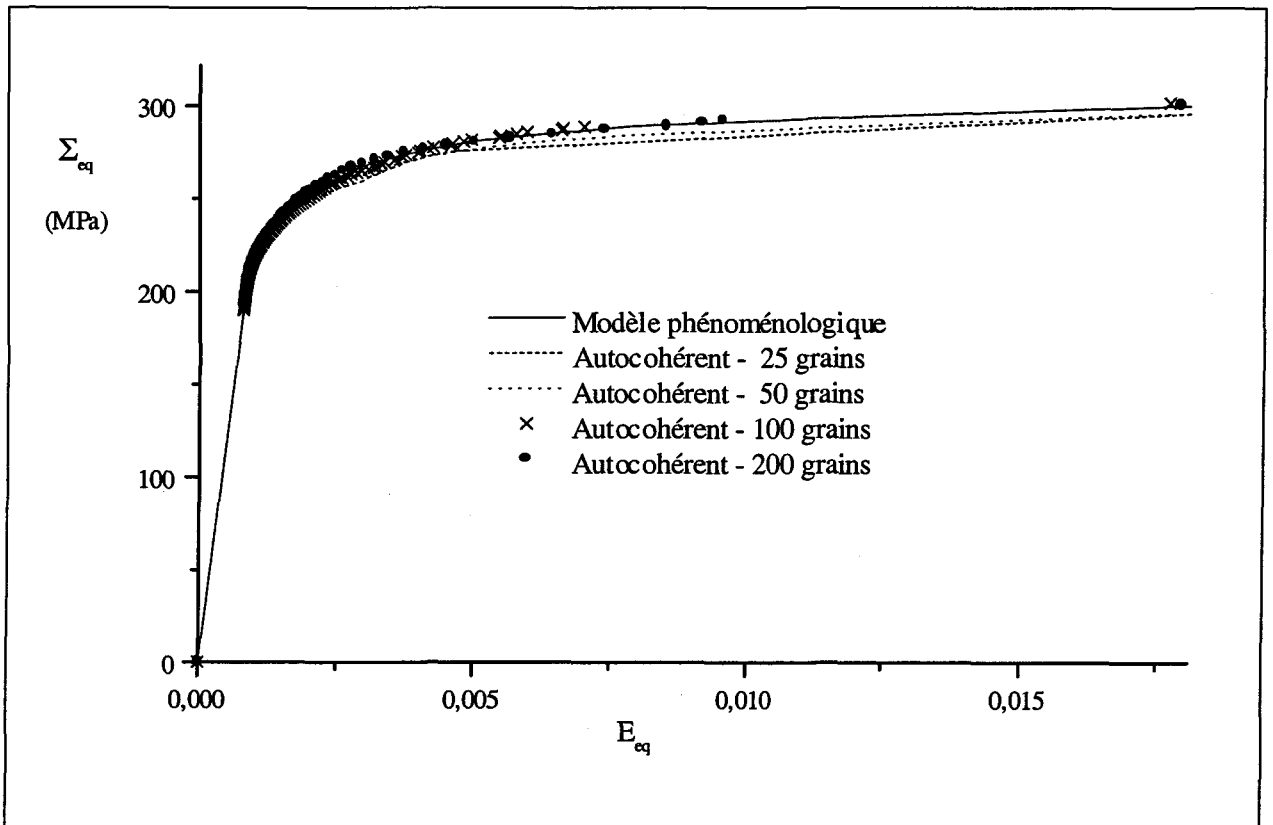


Figure V.6 : Réponse élastoplastique d'un point de Gauss, selon les différentes simulations utilisées.

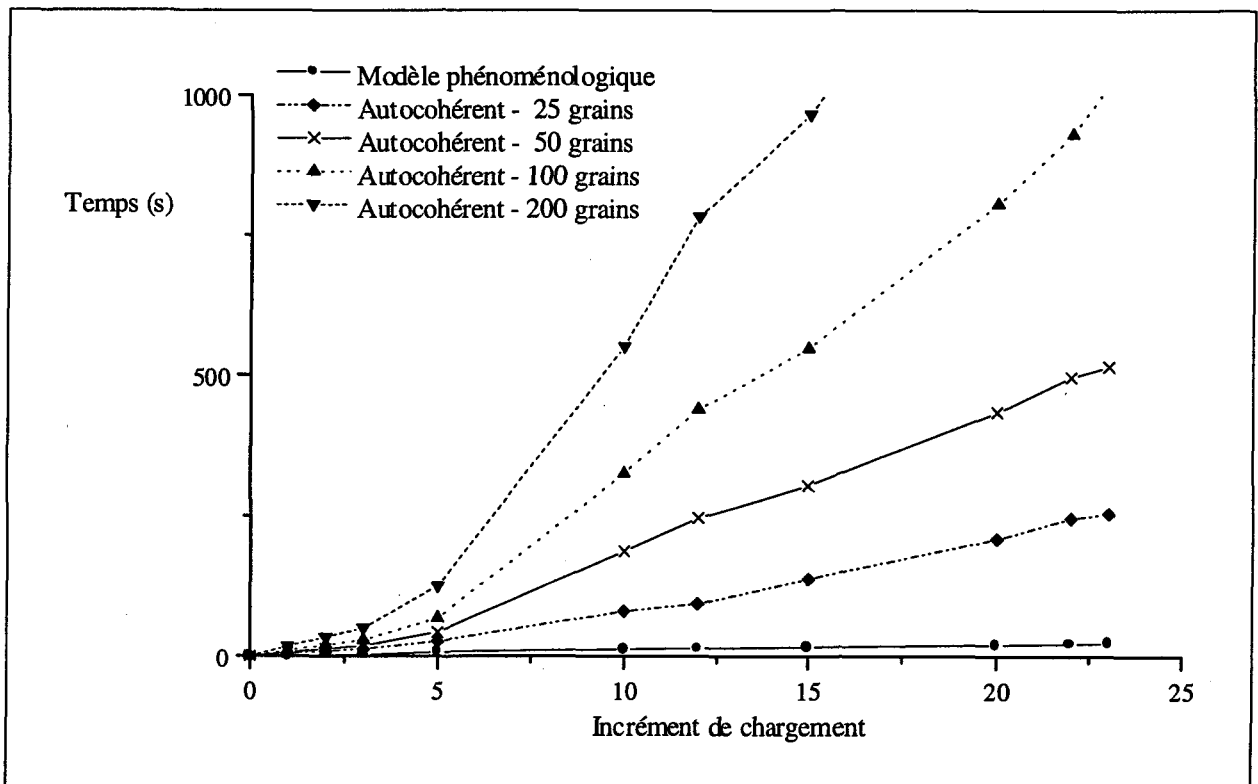
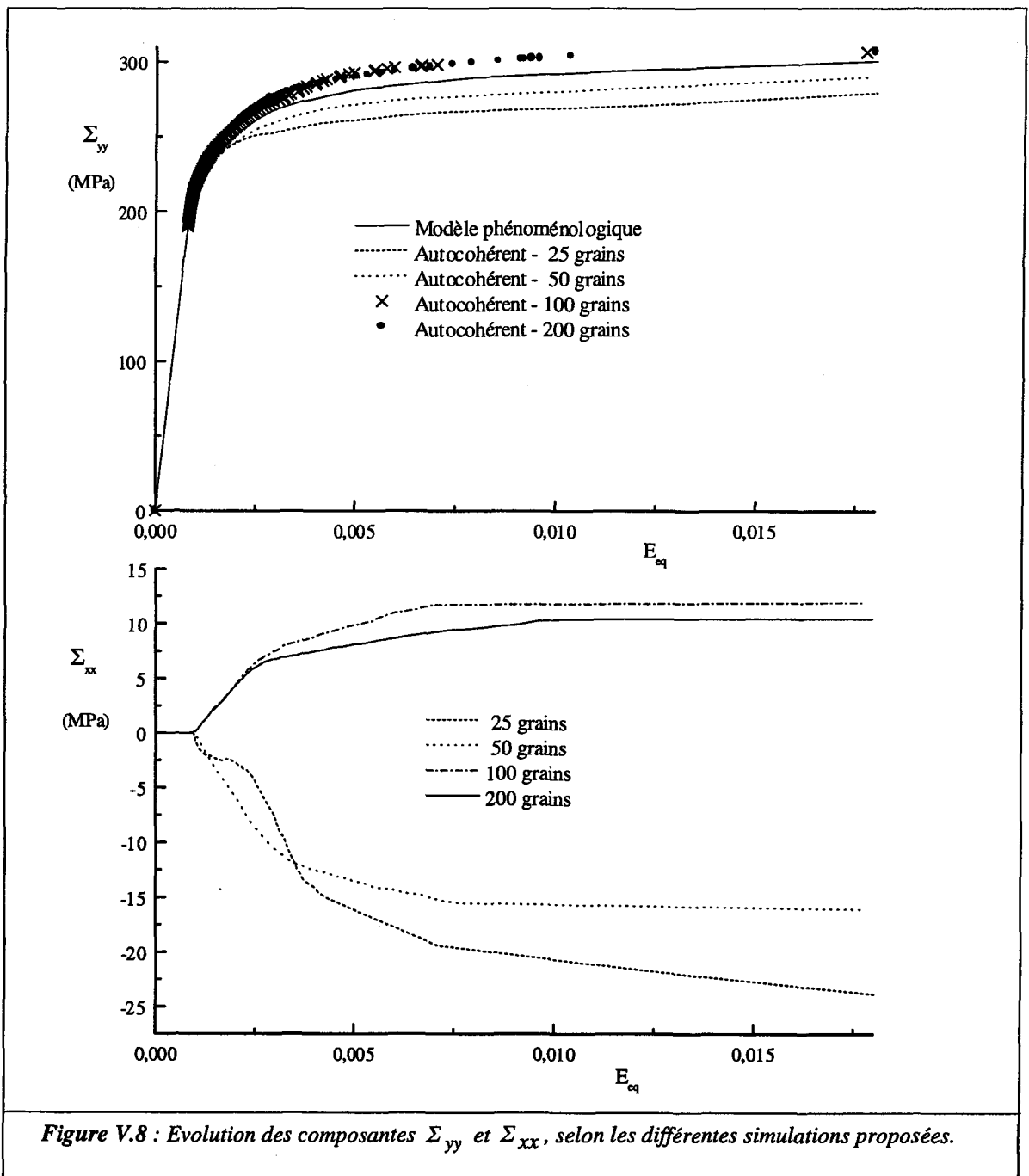
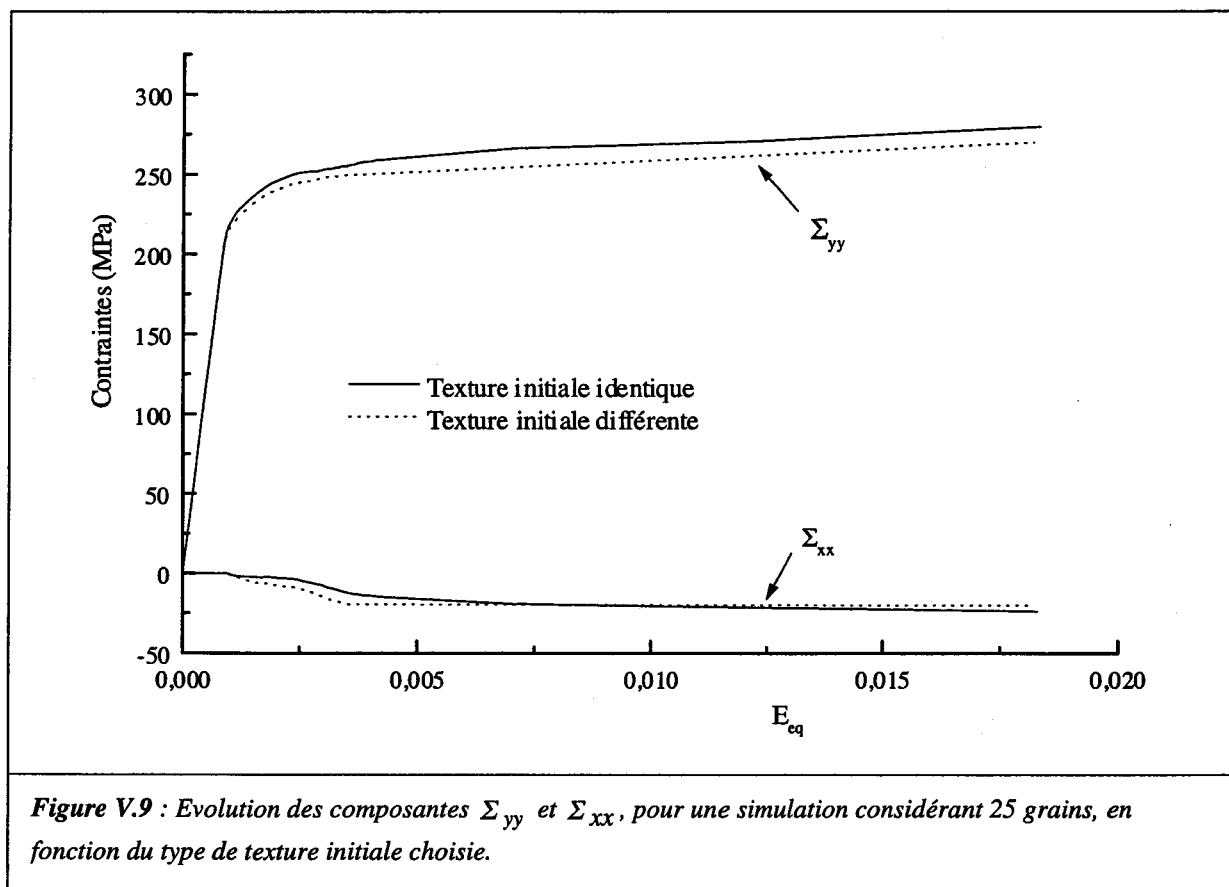


Figure V.7 : Temps de calcul nécessaire aux différentes simulations considérées.

La figure V.7 représente le temps de calcul nécessaire aux différentes simulations étudiées, qui s'est écoulé pour aboutir à la fin de chaque incrément du chargement. C'est un temps système CPU pour des calculs effectués sur une station de travail HP 735. La mise en place du couplage autocohérent à 100 grains consomme 20 fois plus de temps que le code utilisant une approche phénoménologique. Lorsque le nombre de grains est plus faible, si les temps de calcul sont notablement moins importants, on constate que les résultats se caractérisent par un comportement global anisotrope. En effet, hormis la composante de traction Σ_{yy} , on observe l'existence d'autres composantes non nulles du tenseur des contraintes, notamment pour $\Sigma_{xx} = \Sigma_{zz}$. A partir des figures V.8 qui représente les contraintes Σ_{yy} et Σ_{xx} , on remarque une anisotropie croissante lorsque le nombre de grains diminue.



Cette anisotropie est due au choix des orientations cristallographiques qui, étant très limitées et identiques d'un point de Gauss à l'autre, n'arrivent pas à reproduire le comportement uniaxial du matériau. Pour vérifier cette supposition, nous avons effectué une simulation en considérant le polycristal le plus petit en nombre de grains (25), où les orientations cristallographiques aléatoires sont différentes d'un point d'intégration à l'autre. Sur la *figure V.9*, on peut visualiser la comparaison des composantes significatives du tenseur des contraintes, entre une texture initiale identique et différente à chaque point de Gauss. On observe une faible amélioration des résultats. Par conséquent, s'il est vérifié que la description de la texture cristallographique initiale a une influence essentielle sur la qualité des résultats de la modélisation, elle est liée principalement au nombre des grains utilisés.



D'autres vérifications ont été entreprises, notamment l'influence du type d'élément (linéaire ou quadratique), ou du nombre de points d'intégration, dont le but principal était la validation de l'implantation du schéma autocohérent, mais dans ce cas trivial, elles n'ont pas engendré de modifications notables sur les résultats.

En conclusion, on constate que l'intégration de la méthode autocohérent dans un code de calcul des structures a été réussie. Conformément à l'attente, le temps de calcul est très long par rapport à la simulation utilisant un modèle phénoménologique. En considérant à chaque point de Gauss une microstructure constituée de 100 grains, le calcul cristallin représente environ 95% du temps total, et correspond au temps annoncé par Dawson et *al.* (1994) lors de l'utilisation de son code couplé avec un modèle de Taylor. Mais l'obstacle majeur, dans l'utilisation industrielle, est la taille des fichiers d'enregistrement utilisés pour stocker l'état de la microstructure à chaque point de Gauss. En effet, lorsque l'on effectue un maillage composé d'un millier d'éléments, il est nécessaire de réserver une place sur le disque d'environ 500 Mo uniquement pour la description de la microstructure. C'est pourquoi, dans le paragraphe suivant, nous proposons une approche mixte, réalisée par une combinaison d'éléments "autocohérents" et "phénoménologiques".

V.3.3 – Couplage mixte, éprouvette oligocyclique.

La durée de vie d'une structure chargée d'une manière répétitive ou cyclique dépend de nombreux paramètres comme amplitude de chargement, le niveau de la contrainte moyenne, la vitesse de sollicitation (fréquence), etc. Habituellement, on distingue quatre stades dans la durée de vie d'une structure :

- ♦ la phase d'accommodation (mise en place des contraintes internes)
- ♦ le stade d'endommagement (apparition des micro fissures et micro défauts)
- ♦ la phase de propagation des fissures courtes ($a < 0.5 - 1$ mm)
- ♦ le stade de propagation d'une macrofissure

Généralement, on regroupe les trois premières phases de la durée de vie d'une structure et l'on nomme cet ensemble "stade d'amorçage". L'importance du stade d'amorçage par rapport au stade de propagation d'une fissure macroscopique est variable et dépend de la géométrie de la pièce et du matériau. D'une manière générale, pour les éléments de géométrie lisse ou légèrement entaillée (grand rayon de courbure) la durée de vie correspond pratiquement à la phase d'amorçage, alors que les éléments constructifs avec singularités géométriques ont une durée de vie qui peut être assimilée au stade de propagation de la fissure macroscopique. L'exception à la règle est constituée par les joints soudés où la question reste encore ouverte.

En fonction du nombre de cycles à la rupture nous distinguons deux types de fatigue :

- la fatigue oligocyclique où le nombre de cycles est faible ($N < 10^4 - 10^5$)
- la fatigue polycyclique.

La fatigue oligocyclique est caractérisée par deux notions fondamentales, voir par exemple Bathias & Baille (1997), et qui sont :

- ❖ Les matériaux ont une endurance finie au niveau de sollicitation mécanique à laquelle ils sont soumis, et d'après la Norme AFNOR (1990), la rupture se produit pour un nombre de cycle inférieur à 10^5 .
- ❖ A chaque cycle de fatigue, on a une déformation plastique du matériau relativement faible. Cette spécificité rentre bien dans le cadre des hypothèses que nous avons faites pour la construction du modèle autocohérent proposé. Toutefois, Franciosi et *al.* (1999) ont mis en évidence que l'érouissage observé lors d'un très grand nombre de cycles de fatigue correspond à un érouissage en grandes déformations, notamment pour les métaux à structures CFC. Ce phénomène, valable pour les déformations plastiques cumulées importantes, est dû à l'effet de l'énergie élastique stockée. Comme nous le verrons, le modèle que nous avons développé permet de déterminer cette énergie. En tout état de cause, l'exemple que nous présentons est destiné à valider le couplage, et nous ne considérons uniquement que quelques cycles.

Depuis longtemps les chercheurs ont compris l'intérêt d'une analyse locale (micro ou mesoscopique) pour comprendre le phénomène d'amorçage, aussi bien dans le cas de la fatigue poly- que oligocyclique. On motive l'utilisation de la micromécanique en supposant l'existence de grains orientés de telle façon qu'ils subissent des déformations irréversibles produisant des incompatibilités et conduisant, après un nombre de cycles limité, à l'apparition des microdéfauts.

Alors, l'intérêt de l'analyse mécanique locale est de pouvoir proposer une approche unique prédisant le comportement en fatigue des pièces mécaniques entaillées ou lisses à partir d'un critère d'endurance unique, indépendant des conditions de chargement appliquées (chargement uniaxial ou multiaxial).

On voit alors clairement l'intérêt d'utiliser un code de calcul disposant d'une loi de comportement mésoscopique, tel que nous avons développé ici, afin de déterminer la durée de vie des structures métalliques. Cette motivation est d'autant plus grande que le chargement appliqué est complexe (chargement multiaxial).

Dans ce travail, la simulation de l'essai de fatigue est réalisée sur le huitième de l'éprouvette pour des raisons de symétries, évoquées au paragraphe précédent. La géométrie et les dimensions de cette structure sont définies sur la *figure V.10*. On note que le huitième de l'éprouvette est scindé en trois volumes, utilisés uniquement lors de l'opération de maillage. La simulation comporte 3 cycles en traction/compression. Le chargement est réalisé en bout d'éprouvette par un déplacement imposé d'axe (O, \vec{x}) , dont l'évolution est spécifiée par la courbe de la *figure V.11*.

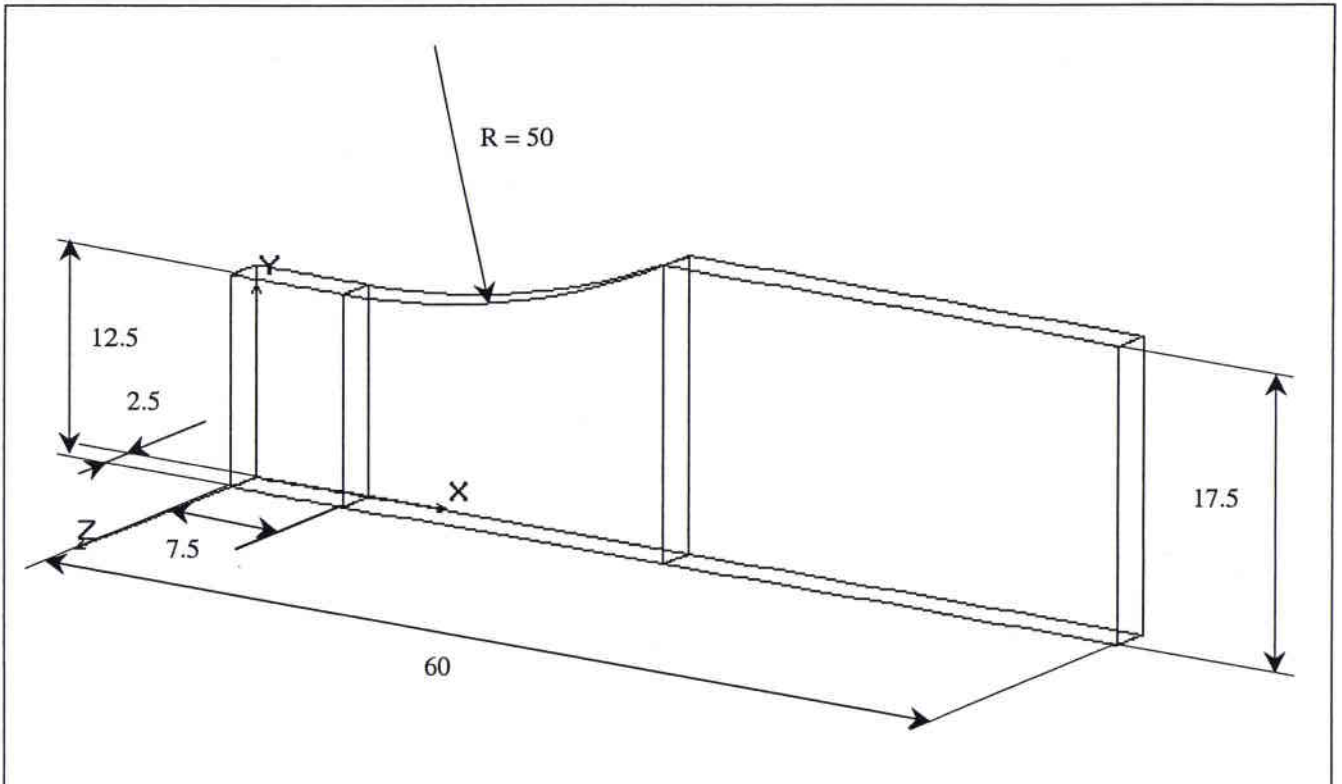
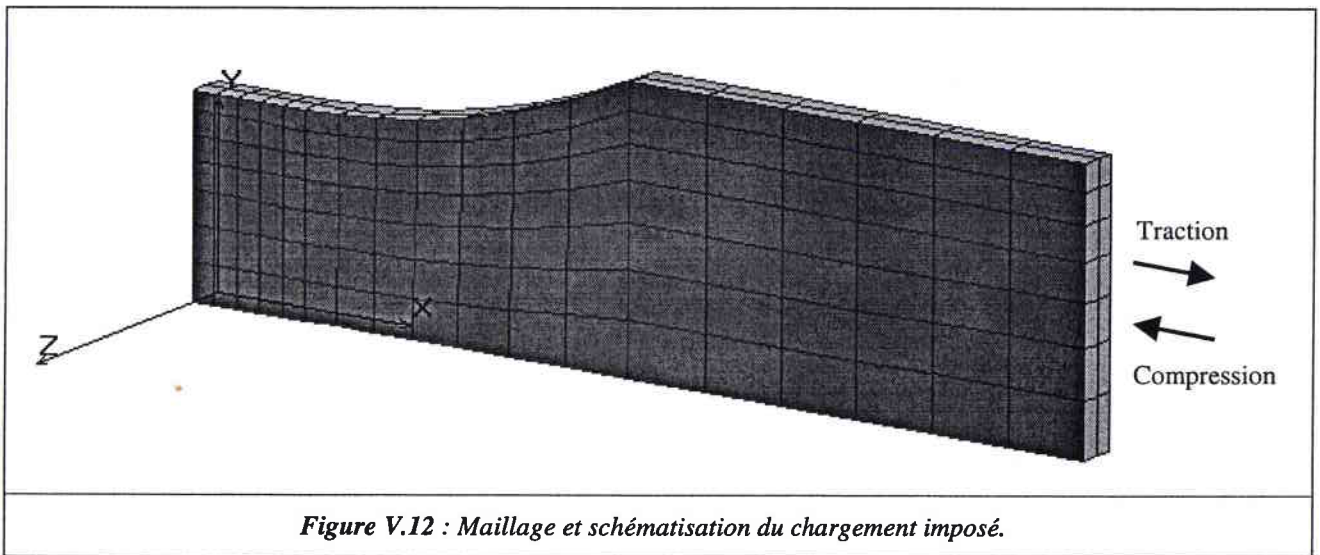
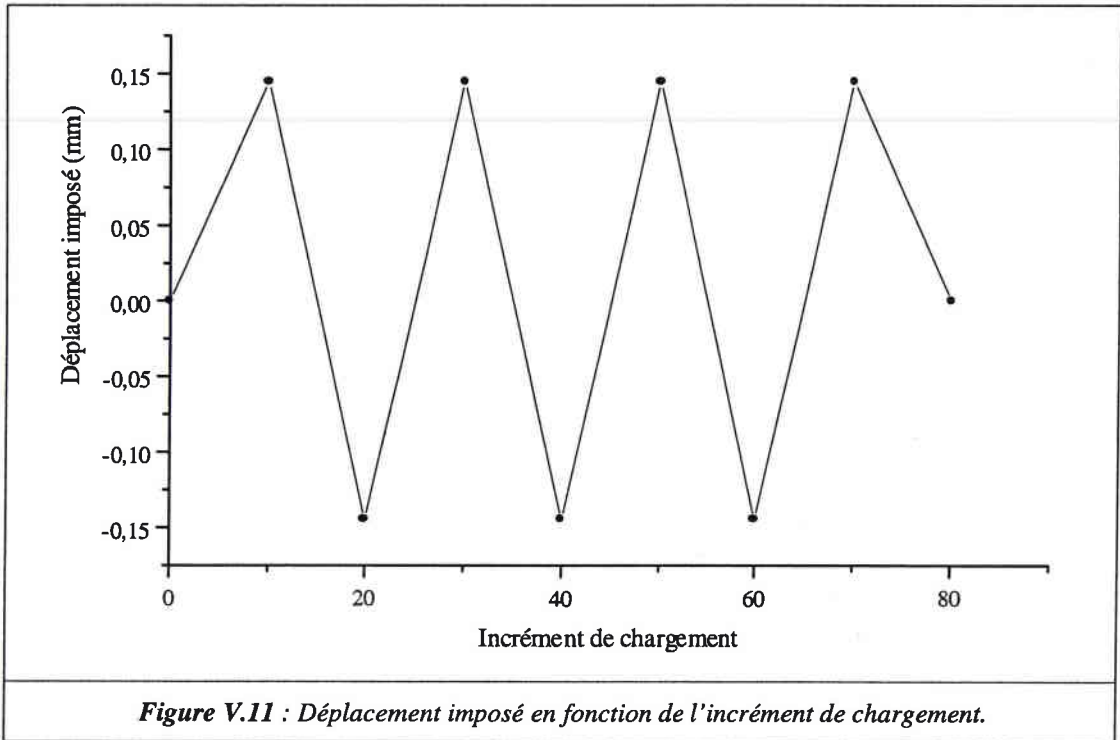


Figure V.10 : Géométrie et dimensions (en mm) du huitième de l'éprouvette.

On discrétise la géométrie en 252 éléments isoparamétriques à 8 nœuds, voir *figure V.12*, pour un total de 456 nœuds. Le problème possède donc 1368 $(= 456 \times 3)$ degrés de liberté, auxquels correspondent autant d'équations non-linéaires à résoudre pour décrire le comportement de la structure.



Pour cette simulation, une partie seulement des éléments du maillage est définie comme étant "autocohérente". Les éléments "phénoménologiques" appartiennent au volume en bout d'éprouvette (cf. *figure V.10*), correspondant à la partie de la structure sur laquelle est appliqué le chargement. On définit le type de traitement de l'élément dans le fichier des données, au niveau de la saisie des liaisons entre éléments. On associe alors à chaque élément une étiquette (sauvegardée dans une

matrice), qui prend la valeur 1 lorsque l'élément doit être traité par le calcul autocohérent, et 0 sinon. Au niveau de l'organigramme de la *figure V.2*, la distinction s'effectue au moment de la détermination des contraintes et des modules tangents à partir du gradient de transformation.

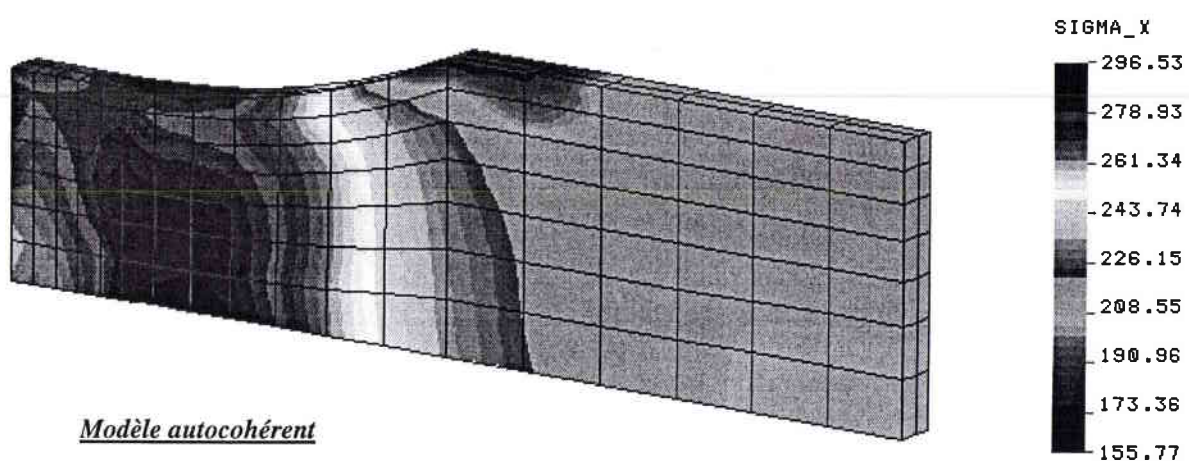
De plus, lors du stockage des informations concernant la microstructure du matériau, les éléments relatifs au traitement phénoménologiques ne doivent pas intervenir, sous peine d'augmenter inutilement la taille du fichier d'enregistrement. Le numéro d'enregistrement (I_{rec}) de la formulation (V.24) ne dépend donc plus directement du numéro de l'élément (I_{elem}), mais d'une matrice ($A(I_{elem})$), dont la valeur est incrémentée de 1 à chaque fois que l'on rencontre un élément autocohérent lors de la saisie des liaisons dans le fichier des données. Dans ce cas, l'expression (V.24) se réécrit :

$$I_{rec} = (A(I_{elem}) - 1) \times N_{gauss} \times N_{grain} + (I_{gauss} - 1) \times N_{grain} + I_{grain} \quad (V.26)$$

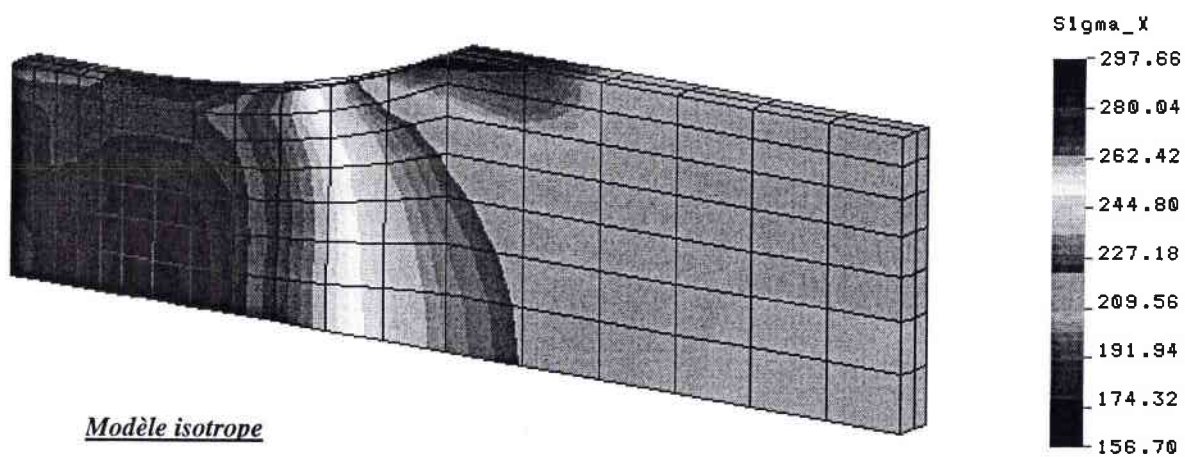
Pour le problème étudié ici, cette démarche permet d'économiser environ 30% de place mémoire, par rapport à un code dans lequel tous les éléments seraient traités par un schéma autocohérent.

La simulation est réalisée par un couplage avec la méthode autocohérente, considérant un agrégat de 100 grains d'orientations cristallographiques prises aléatoirement et identiques pour tous les points d'intégration, ainsi que deux approches phénoménologiques, respectivement à écrouissage isotrope et cinématique. On considère ici la même loi de comportement du matériau que celle utilisée dans l'exemple précédent. Nous rappelons qu'il a été nécessaire de caler les lois des différents modèles, comme cela est représenté sur la *figure V.4*.

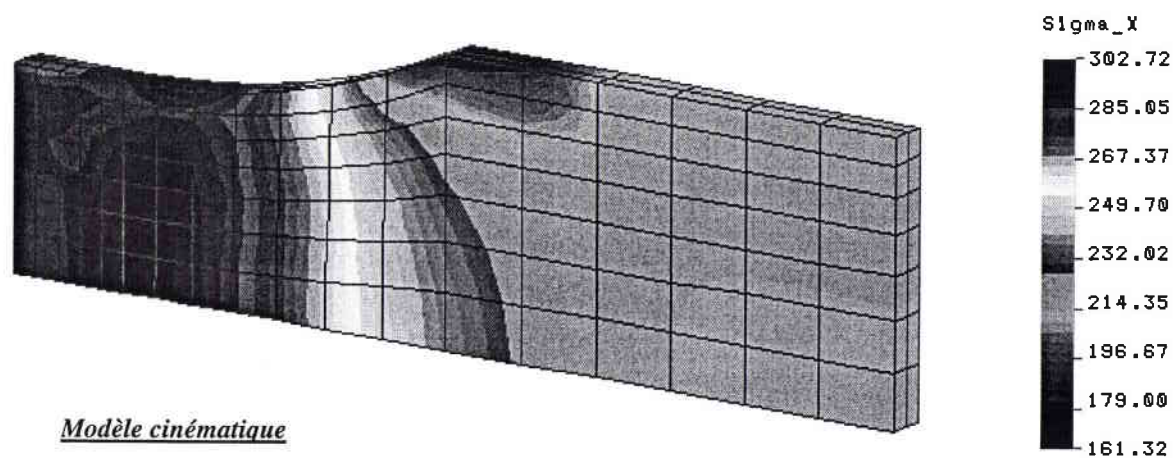
Lors de la première mise sous charge, on peut constater sur la *figure V.13* que les distributions des contraintes calculées par les différents modèles sont quasiment identiques. Ce premier résultat permet de confirmer que le couplage de l'approche autocohérente dans le code d'éléments finis est bien réalisé, et que les résultats obtenus lors de la simulation d'un chargement en traction simple sont conformes à ceux donnés par les lois habituellement utilisées, même lorsque la géométrie de la structure est relativement complexe.



Modèle autocohérent



Modèle isotrope



Modèle cinématique

Figure V.13 : Comparaison des distributions des contraintes Σ_x à la fin de la première mise sous charge.

Lors de l'essai en fatigue, nous nous sommes intéressés à l'évolution de la contrainte σ_x et de la déformation plastique ε_x^p d'un point de Gauss particulier de la structure.

Sur la *figure V.14*, on a représenté la contrainte σ_x en fonction du temps. Ce temps ne correspond pas au "temps physique", il constitue uniquement un paramètre associé à l'incrémentation du chargement. Sur cette figure, on observe une différence notable entre les résultats obtenus avec les différents modèles étudiés, excepté bien sûr lors de la première mise sous charge où les résultats sont identiques. On constate qu'en utilisant un modèle à écrouissage cinématique, la contrainte maximale n'évolue pas, contrairement au schéma autocohérent ou à l'approche phénoménologique avec écrouissage isotrope. Ce modèle ne permet donc pas de faire apparaître l'écrouissage cyclique du matériau et sous-estime la contrainte au cours de la compression du fait qu'il engendre, de par sa construction, un effet Bauschinger fortement prononcé. On voit, dès à présent, l'importance que tient la loi de comportement dans la méthode des éléments finis, et les conséquences de son choix sur les résultats.

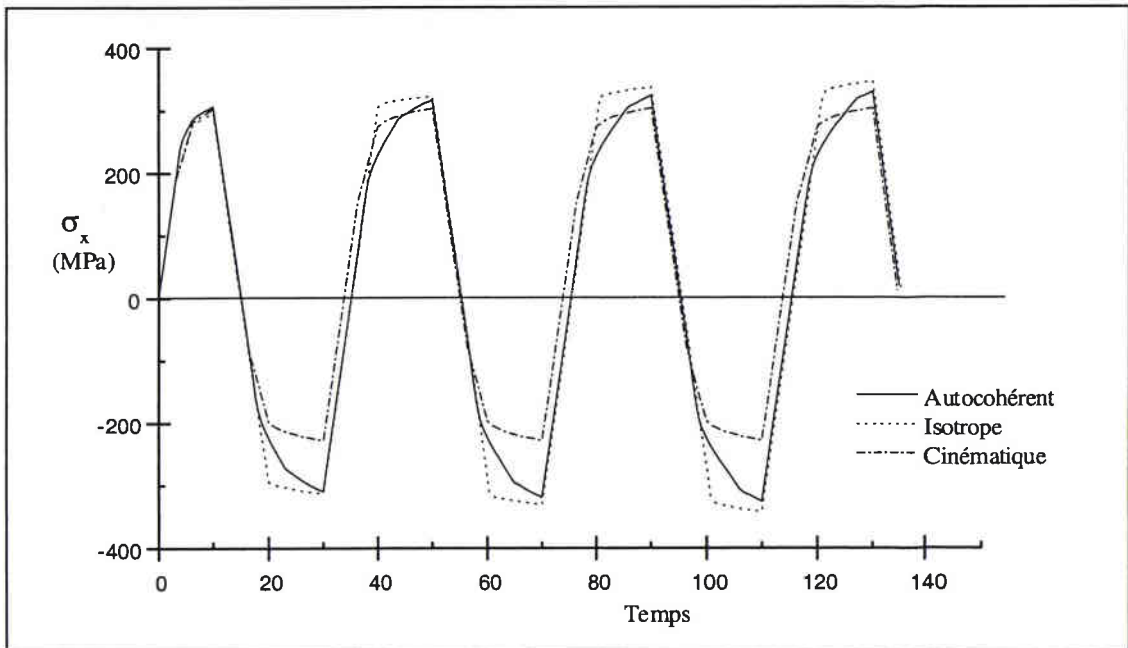


Figure V.14 : Evolution de la contrainte d'un point de Gauss, en fonction du temps, calculée par les différents modèles.

Sur la *figure V.15*, on a représenté l'évolution de la déformation plastique en fonction du temps. Les paliers correspondent ici à la décharge élastique à chaque changement du trajet de chargement. En ce qui concerne le modèle à écrouissage cinématique, le constat est similaire à celui effectué précédemment, pour lequel on remarque que la déformation plastique à chaque fin de cycle

n'évolue pas, avec une importante surestimation lors de la compression. Quant à l'approche autocohérente et au modèle à écrouissage isotrope, on remarque que le phénomène d'accommodation plastique est bien représenté par une diminution de la déformation plastique maximale. Toutefois, on observe qu'en utilisant le modèle à écrouissage isotrope, cette diminution est fortement accentuée, et devrait conduire rapidement à une déformation plastique nulle. L'emploi de l'approche couplée se manifeste par une réponse intermédiaire.

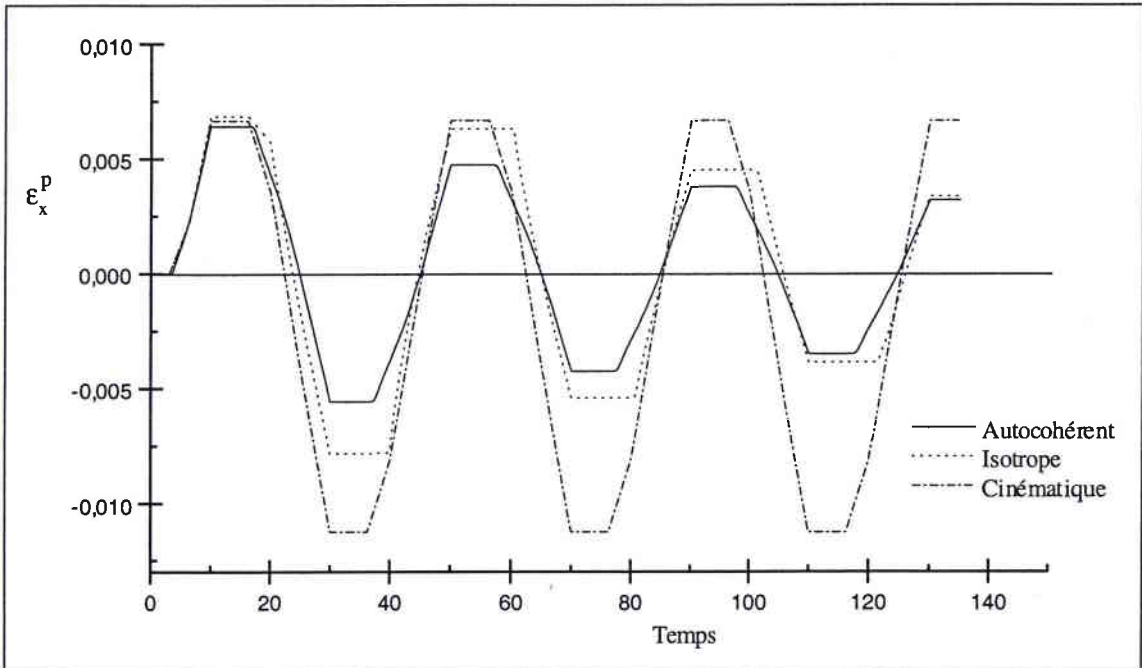


Figure V.15 : Evolution de la déformation plastique d'un point de Gauss, en fonction du temps, obtenue à l'aide des différents modèles.

Le problème de l'accommodation plastique se retrouve sur la *figure V.16*, représentant les cycles de fatigue obtenus avec les différents modèles étudiés. On retrouve bien une augmentation de la contrainte maximale avec l'approche autocohérente et le modèle phénoménologique à écrouissage isotrope, que l'on ne retrouve pas avec un écrouissage cinématique, pour lequel les cycles de fatigue se réduisent à une boucle unique. Dans le cas de l'écrouissage isotrope, si la consolidation à chaque cycle est linéaire, cela est directement lié à la simulation autocohérente servant pour caler les modèles, où l'on fait l'hypothèse que la matrice d'écrouissage n'évolue pas au cours de la déformation plastique, comme cela a été exposé dans le chapitre IV. De plus, on remarque bien que l'effet Bauschinger est totalement absent des boucles d'hysteresis, et confirme ainsi ce qui a été dit dans le chapitre II à ce sujet. On observe également que les lois de comportement autocohérente et isotrope prédisent un écrouissage cyclique, qui est absent dans la simulation à écrouissage cinématique.

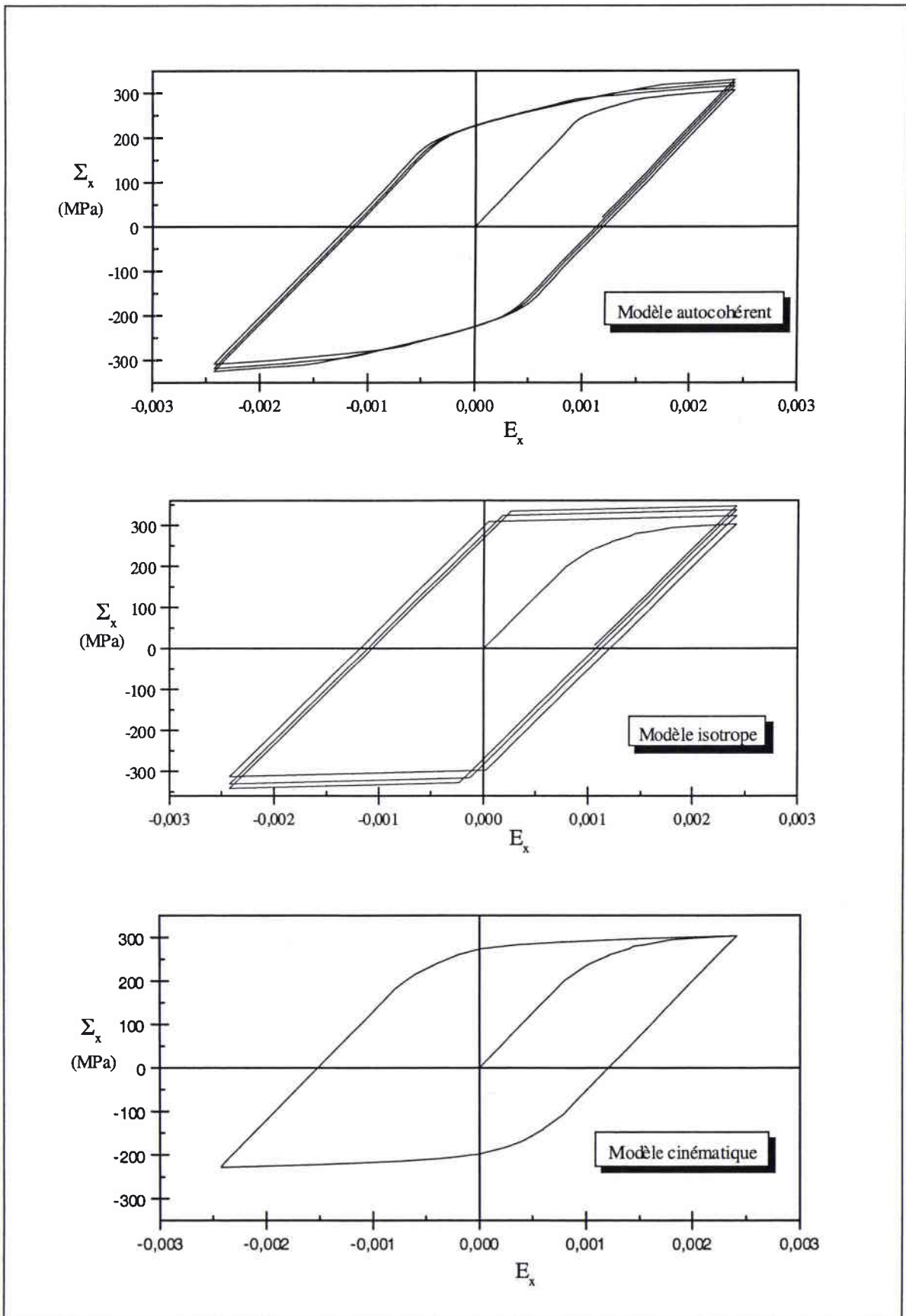


Figure V.16 : Boucles de fatigue obtenues avec les différents modèles étudiés.

On s'intéresse maintenant à l'état interne de l'éprouvette après que tous les cycles de fatigue aient été réalisés, ainsi que le déchargement.

La *figure V.17* représente la déformation plastique, après déchargement, obtenue à l'aide des différents modèles présentés. L'effet Bauschinger exagéré du modèle à écrouissage cinématique, a pour conséquence que le début de l'écoulement plastique commence, lors de la première compression, pour des valeurs faibles de la contrainte (en valeur absolue). A partir de là, et jusqu'à la fin de l'essai de fatigue, la déformation plastique est surestimée, telle que le laisse apparaître la *figure V.17*. Dans le cas du modèle à écrouissage isotrope, comme il a été dit précédemment, la déformation plastique diminue rapidement au cours de l'essai de fatigue et devrait devenir nulle pour un nombre de cycles supérieur à celui qui a été choisi dans le travail présenté. Cette hypothèse devra être confirmée par une simulation d'un essai comportant un nombre de cycles plus élevé. On constate que la taille de la zone plastique est légèrement plus grande lorsque l'on utilise l'approche autocohérente.

En fatigue oligocyclique, le comportement d'une structure dépend fortement de l'évolution de l'énergie élastique stockée, notamment dans la phase d'accommodation. Cette énergie est définie à partir des contraintes résiduelles, et lorsque l'on considère les contraintes d'ordre I, elle s'écrit :

$$U_b^\sigma = \frac{1}{2} \Sigma_{ij} S_{ijkl} \Sigma_{kl} \quad (\text{V.27})$$

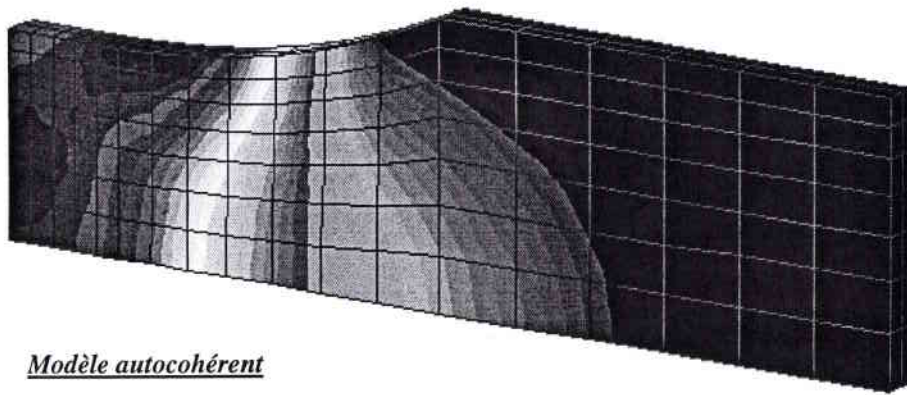
où S_{ijkl} sont les composantes du tenseur de compliance.

La *figure V.18* représente la distribution de l'énergie stockée en fin de cycle, après déchargement. On constate que la distribution est quasi identique quelle que soit l'approche utilisée. Mais cette énergie n'est pas représentative de l'état interne du matériau. En effet, il est nécessaire pour cela, de considérer les contraintes résiduelles d'ordre II, associées à l'état de la microstructure. Dans ce cas, l'énergie élastique stockée s'écrit :

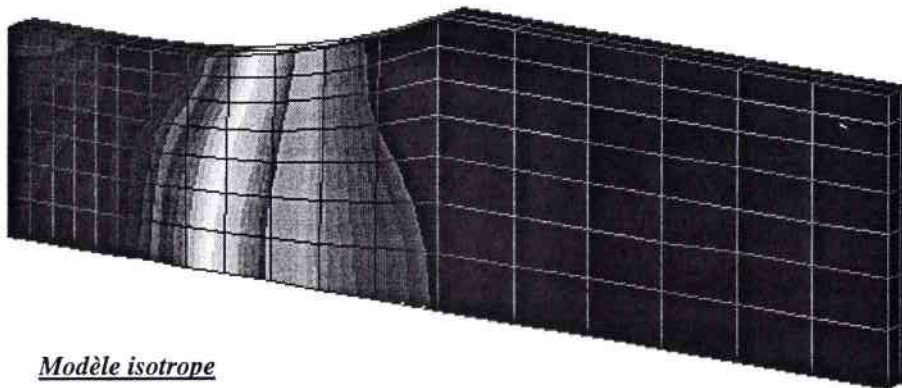
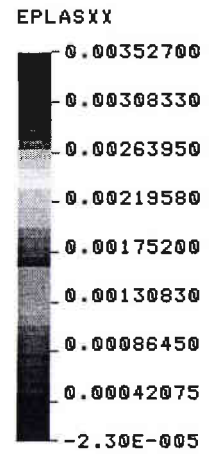
$$U_b^\sigma = \frac{1}{2} \sum_{I=1}^N f^I \sigma_{ij}^I S_{ijkl} \sigma_{kl}^I \quad (\text{V.28})$$

où f^I est la fraction volumique de chaque grain I (pour un polycristal constitué de N grains).

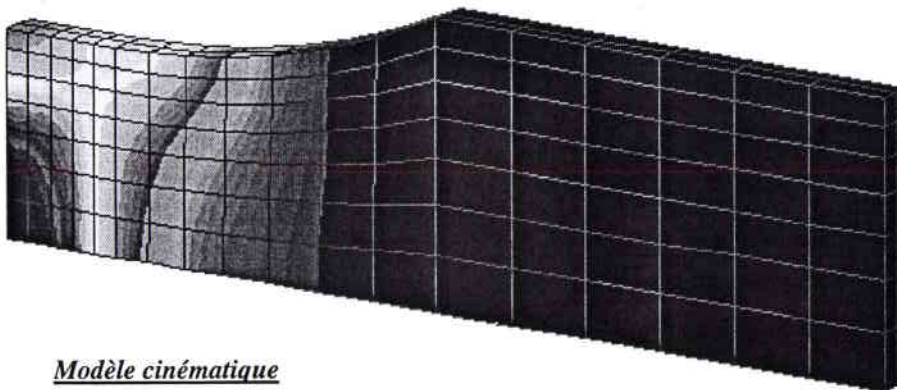
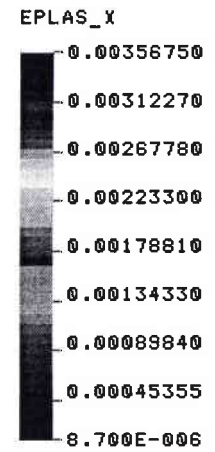
De par son expression, on constate que cette énergie ne peut être déterminée à partir d'approches phénoménologiques, et seul un modèle à transition d'échelle est adapté à ce genre de calcul. La distribution de cette énergie est donc représentée sur la *figure V.19* uniquement pour le couplage autocohérent. On constate que cette énergie est environ 8 fois supérieure à celle présentée précédemment.



Modèle autocohérent



Modèle isotrope



Modèle cinématique

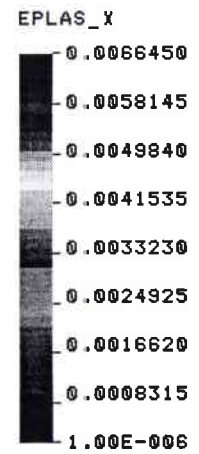
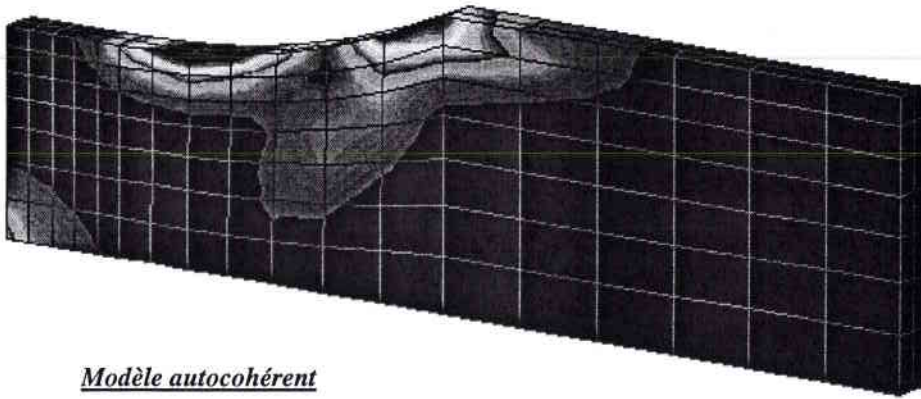
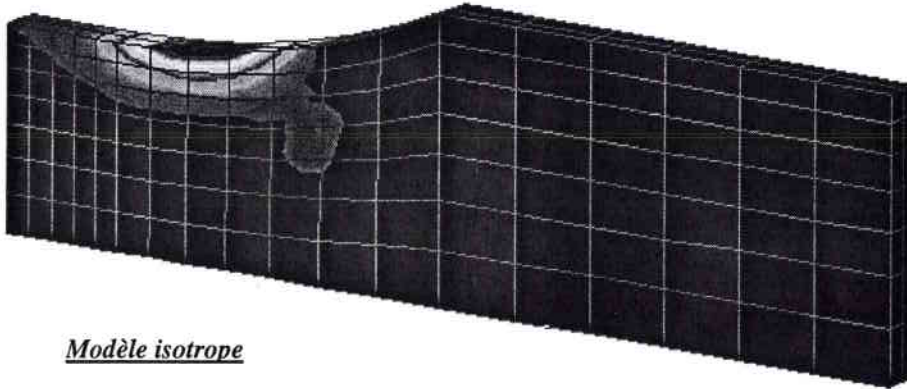
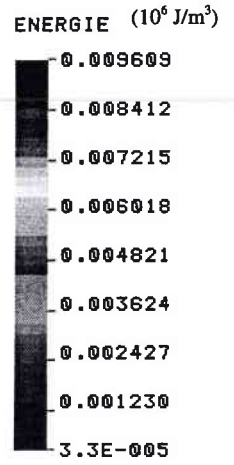


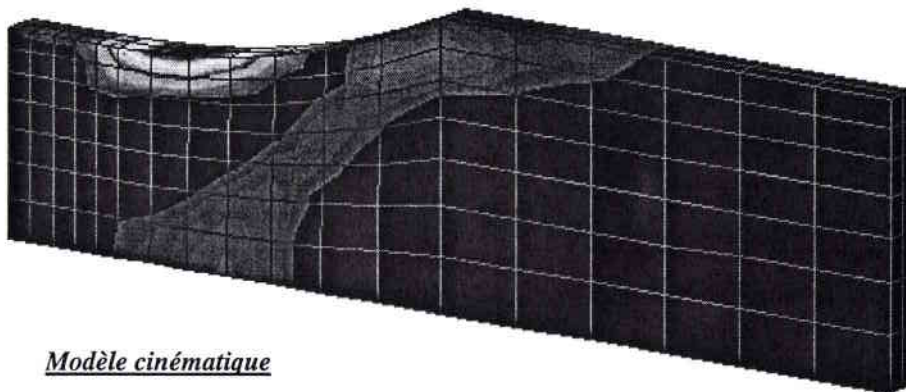
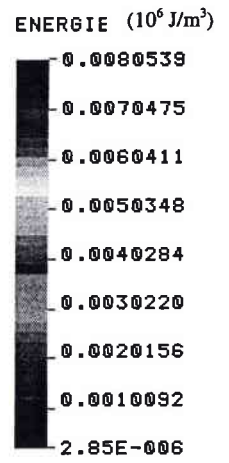
Figure V.17 : Comparaison des déformations plastiques après déchargement, obtenues par les différents modèles.



Modèle autocohérent



Modèle isotrope



Modèle cinématique

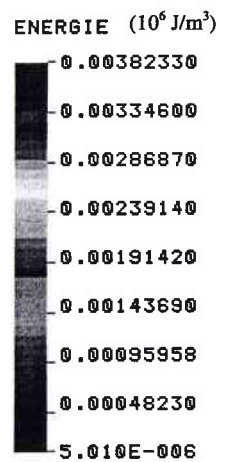
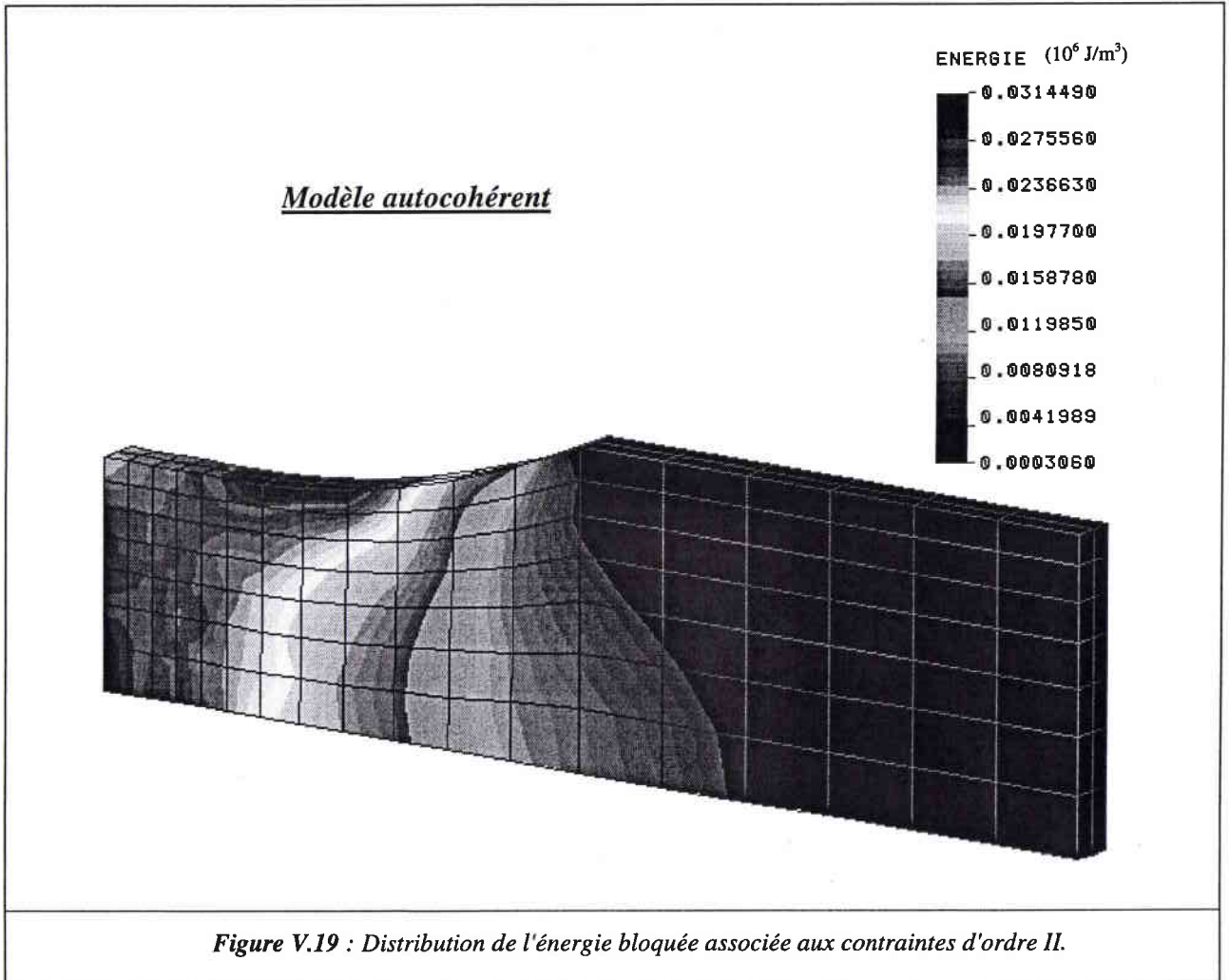


Figure V.18 : comparaison de l'énergie bloquée après déchargement, obtenue à l'aide des différents modèles.



D'une manière générale, le couplage utilisant l'approche autocohérente fournit des résultats intermédiaires à ceux issus respectivement des modèles à écrouissage isotrope et cinématique. Mais l'avantage majeur de sa mise en œuvre réside dans sa capacité à pouvoir prendre en compte l'évolution de l'état microstructural. Comme nous l'avons vu, cet état, au travers des contraintes d'ordre II, est à l'origine de l'importance de l'énergie bloquée, responsable de l'endommagement en fatigue oligocyclique. Bien sur, cet apport d'informations supplémentaires à un coût en terme de temps de calcul et de place mémoire sur le disque. Le couplage mixte permet alors de résoudre partiellement le problème. En effet, 1 seconde de calcul d'un modèle phénoménologique, nécessite 20 secondes avec le couplage complet, présenté dans le paragraphe précédent (à 100 grains par points de Gauss). Pour cet exemple, où 182 éléments sont "autocohérents", le temps est ramené à environ 14.7 secondes $\left(20 \times \frac{182}{252} + 1 \times \frac{70}{252}\right)$. Si cela demeure relativement élevé, il est à noter que lors du déroulement des calculs par le couplage autocohérent, nous avons observé que les forces résiduelles, utilisées dans la convergence des résultats, étaient plus faibles à chaque incrément, par

rapport aux modèles phénoménologiques. Ce point n'est pas étudié ici, mais devra faire l'objet de recherches supplémentaires, en vue de l'amélioration du code.

Le couplage mixte permet aussi de manipuler des fichiers d'enregistrement occupant une place moindre sur le disque dur. Le stockage des données relatives à l'état de la microstructure nécessite, dans le cas de 252 éléments "autocohérents", une place mémoire de 62.9 Mo ($252 \times 249.6 Ko$). Dans ce problème la taille du fichier est de 45.4 Mo ($182 \times 249.6 Ko$), soit un gain d'environ 17.5 Mo pour une structure comportant relativement peu d'éléments. Mais si, dans cet exemple, la localisation de la zone plastique est évidente, elle est moins immédiate, voire complexe, pour des structures plus évoluées. Afin de répondre à cette difficulté, nous proposons, dans l'exemple suivant, un couplage qui détermine automatiquement (par un critère de plasticité) les zones qui se plastifient en cours de chargement.

V.3.4 – Couplage adaptatif, tube sous pression

Le problème posé ici, est la simulation du comportement d'un tube coudé, fixé sur un réservoir et soumis à une pression interne.

La *figure V.20* représente la partie de la structure que l'on va étudier, avec une symétrie par rapport au plan (O, \bar{x}, \bar{z}) . Cette structure, relativement complexe, constitue un véritable problème tridimensionnel, et va nous permettre de tester le couplage proposé au travers de ce cas non trivial.

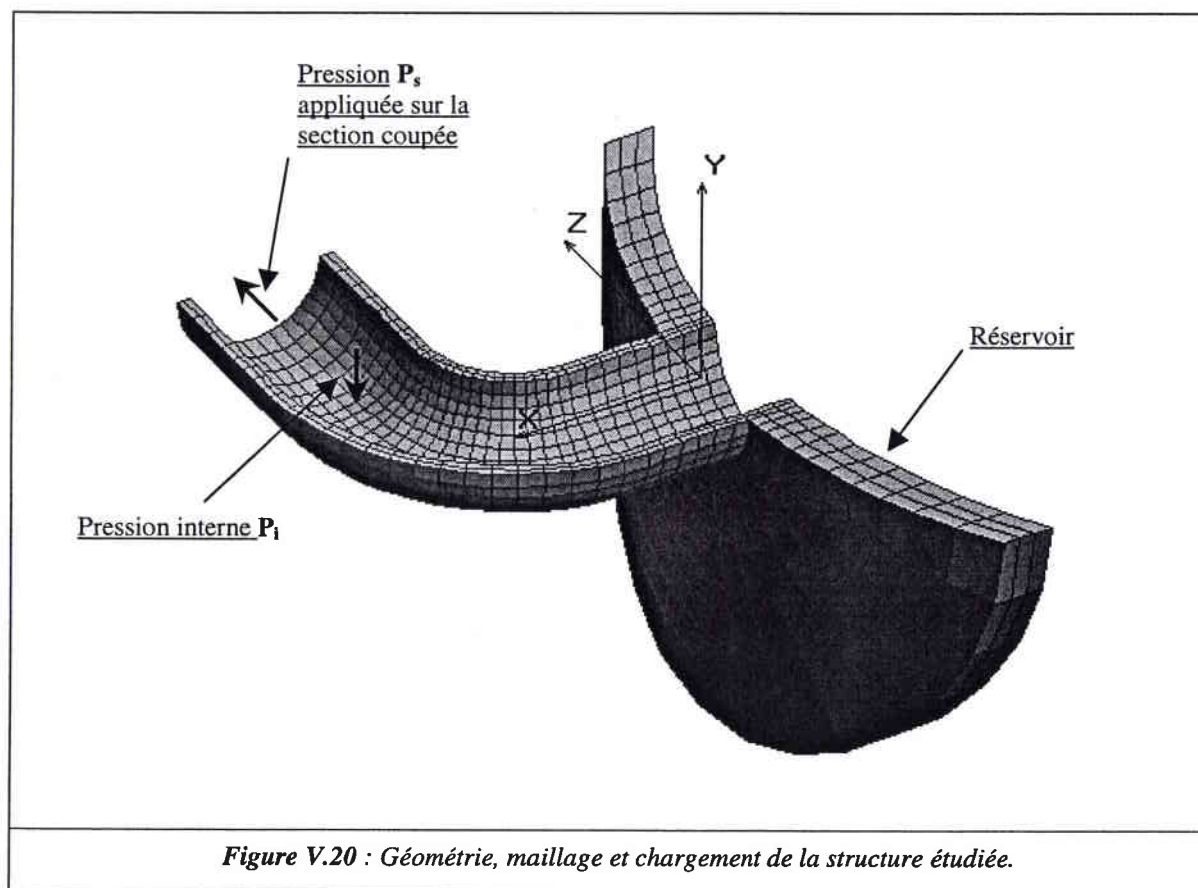


Figure V.20 : Géométrie, maillage et chargement de la structure étudiée.

Le maillage comporte 1584 éléments isoparamétriques à 8 nœuds, et 2482 nœuds au total. Le comportement est donc décrit par la résolution d'un système de 7446 équations non linéaires. Vu l'importance du nombre d'éléments, il est inconcevable de vouloir utiliser un couplage complet. Non seulement les temps de calculs seraient augmenter inutilement, et de façon considérable, mais aussi le fichier de stockage des données relatives à la microstructure occuperait une place mémoire de 395.3 Mo ($1584 \times 249.6 \text{ Ko}$) sur le disque, avec les pertes de temps supplémentaires associés à la manipulation informatique d'un tel fichier. Contrairement à l'exemple précédent, la mise en œuvre du couplage mixte n'est pas immédiate. Il est plus délicat de déterminer, a priori, la localisation de la zone plastique, et surtout l'étendue de celle-ci, puisqu'elle dépend directement de l'intensité du chargement. C'est pourquoi nous proposons un code capable de changer, au cours des calculs, le type de loi de comportement considéré à chaque point d'intégration. Initialement tous les éléments sont associés à une loi de comportement phénoménologique. Dans l'organigramme de la *figure V.2*, cette loi permet la détermination des contraintes et des modules tangents en chaque point de Gauss de la structure. La plastification a lieu si l'état de contrainte calculé vérifie le critère de Tresca. Dans ce cas l'étiquette est modifiée, et à partir de là, les calculs **en ce point d'intégration** sont effectués suivant un schéma autocohérent. La nouvelle étiquette est sauvegardée dans une matrice fonction du numéro de l'élément et du numéro du point de Gauss de cet élément. On attribue une texture cristallographique aléatoire (100 grains), pris initialement identique pour chaque nouveau point d'intégration qui se plastifie. On incrémente de 1 une matrice $A(I_{elem}, I_{gauss})$, utilisée pour l'enregistrement des données concernant la microstructure du matériau. Le numéro d'enregistrement (I_{rec}) de la formulation (V.26) n'est plus relatif à un élément "autocohérent", mais à un point de Gauss, et à pour nouvelle expression :

$$I_{rec} = (A(I_{elem}, I_{gauss}) - 1) \times N_{grain} + I_{grain} \quad (V.29)$$

On utilise de la place mémoire uniquement pour les points d'intégration qui se plastifient, on minimise ainsi la taille du fichier d'enregistrement.

Le chargement que l'on applique à la structure est le suivant :

- ◆ Pression interne p_i à l'intérieur du tube, et pression p_s sur la section coupée permettant d'assurer l'équilibre statique, tel que l'on ait :

$$p_s = p_i \frac{D^2}{4e(D+e)} \quad (V.29)$$

où D est le diamètre intérieur du tube et e son épaisseur (ici, $D = 200 \text{ mm}$ et $e = 20 \text{ mm}$)

- ◆ Evolution de la pression p_s (p_i étant constant) permettant de simuler, par exemple, les dilatations thermiques au niveau du piquage.
- ◆ Décharge de l'ensemble.

Sur la *figure V.21*, on peut suivre l'évolution des différentes pressions en fonction des incréments du chargement.

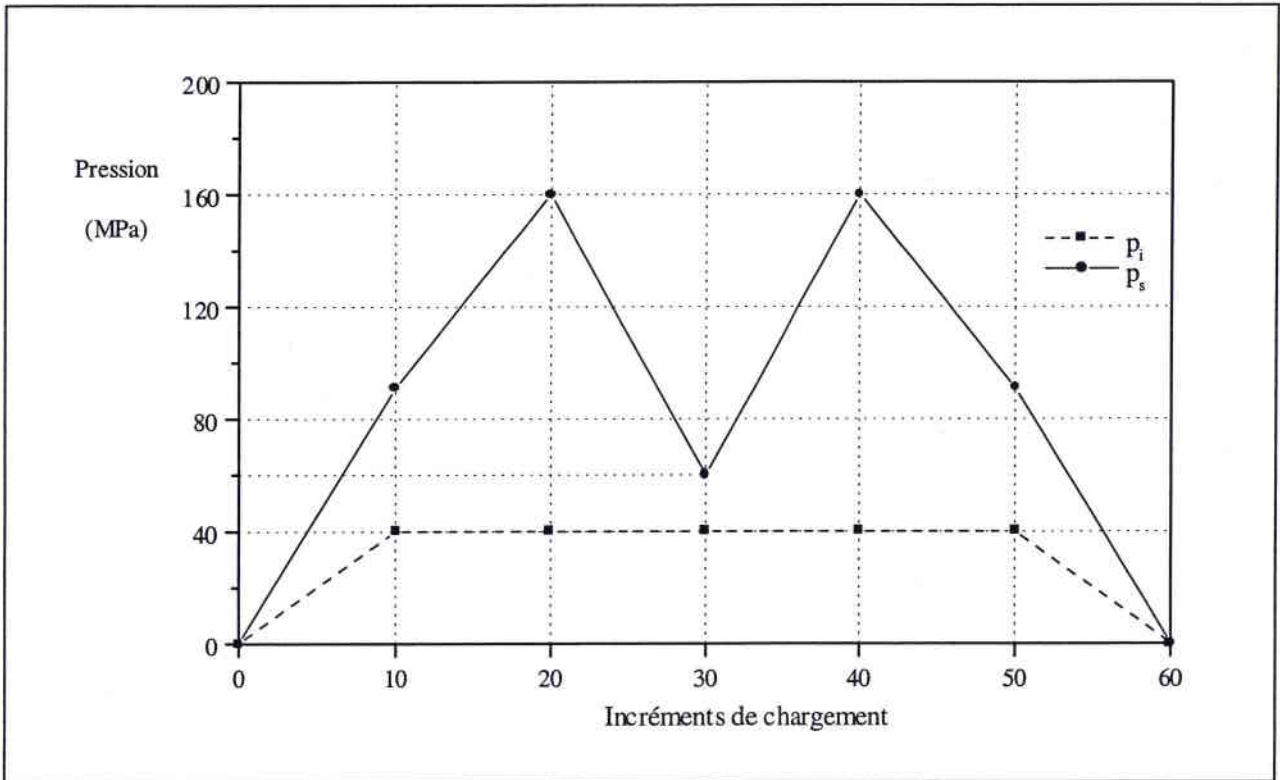


Figure V.21 : Evolution des différentes pressions appliquées à la structure.

L'étude est réalisée à l'aide des trois modèles déjà utilisés dans l'exemple précédent. Contrairement à celui-ci, on cale au mieux le modèle autocohérent sur des valeurs $\Sigma_{eq} = f(E_{eq})$ obtenues à partir de données expérimentales, et qui seront utilisées dans les approches phénoménologiques. Cette simulation autocohérente est représentée sur la *figure V.22*, et concerne un acier de structure bainitique, avec les propriétés élastiques suivantes :

- Module de cisaillement : $\mu = 87\,600 \text{ MPa}$
- Coefficient de Poisson : $\nu = 0.3$
- Limite d'élasticité : $\sigma_y^0 = 445 \text{ MPa}$

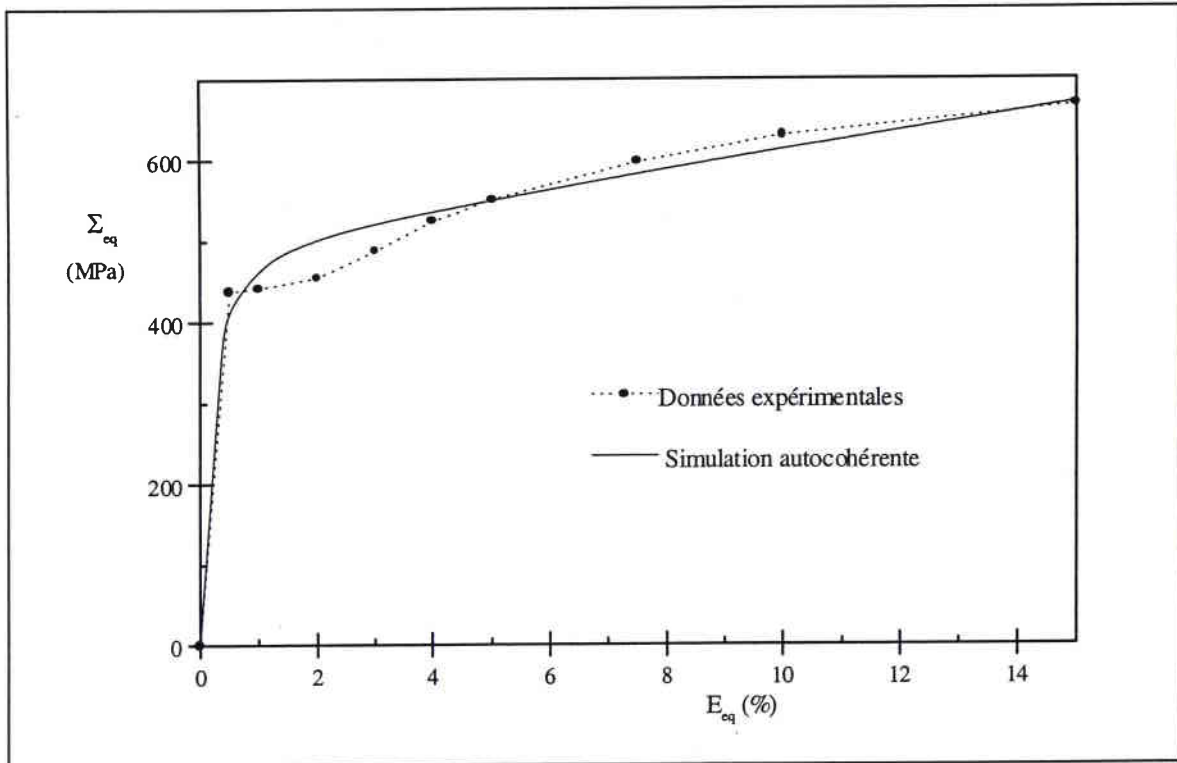


Figure V.22 : Approximation autocohérente de données expérimentales.

Lors de la première mise sous charge, on a représenté sur la *figure V.23* les distributions des contraintes équivalentes obtenues par les différents modèles. Les résultats issus de la simulation autocohérente sont en bonne corrélation avec ceux des lois phénoménologiques. Toutefois, on remarque une légère différence, qui a comme origine l'utilisation de lois de comportement des différentes approches qui ne sont pas rigoureusement identiques, comme le montre la *figure V.22*. On peut émettre la même observation en ce qui concerne les distributions des déformations plastiques équivalentes de la *figure V.24*. Sur cette figure, on constate que les zones plastiques sont localisées à certains endroits de la structure, et sont bien caractérisées par la mise en œuvre du couplage adaptatif. On valide ainsi son aptitude à définir les zones de la structure qui se plastifient.

Lors de l'évolution du chargement, on étudie le comportement d'un point de Gauss particulier (appartenant à la zone de la structure qui a la déformation plastique la plus importante).

Les *figures V.25* et *V.26* représentent l'évolution respective de la contrainte Σ_{xx} et Σ_{yy} , en ce point de Gauss. On note que la courbe d'évolution de ces contraintes, obtenue par le couplage proposé est tout à fait semblable aux courbes issues des modèles phénoménologiques.

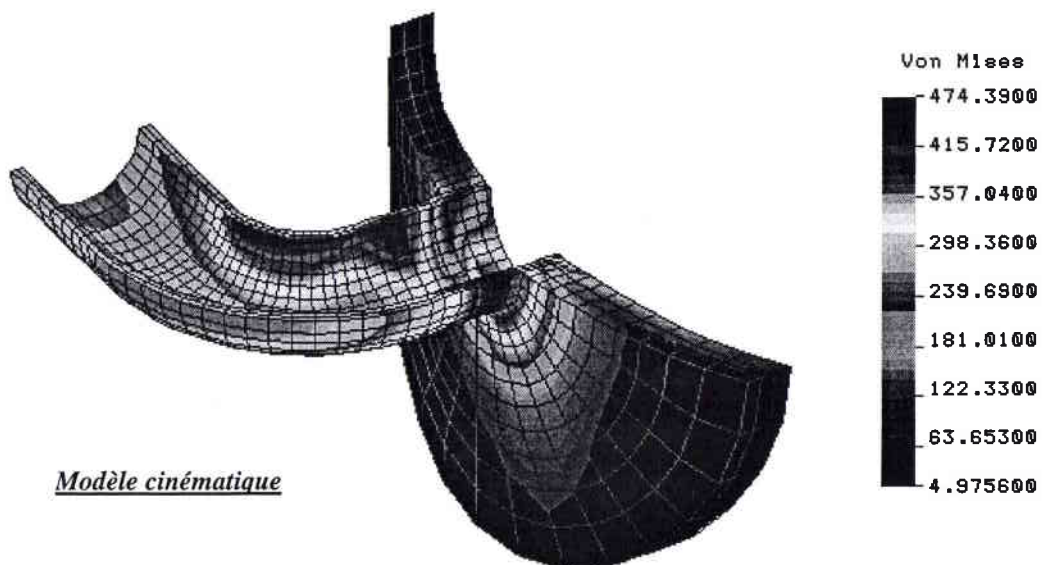
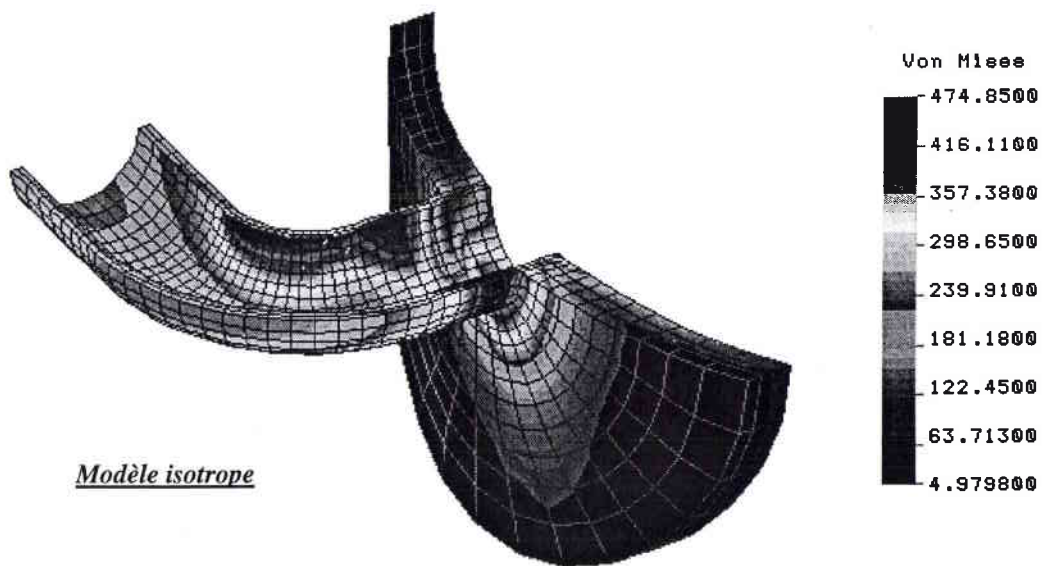
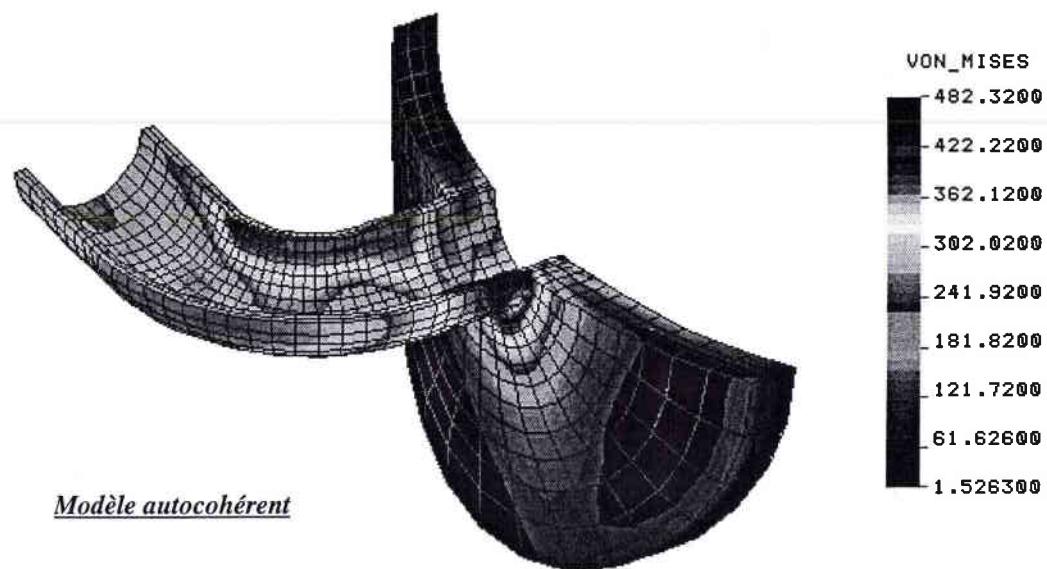


Figure V.23 : Distributions des contraintes équivalentes (MPa) obtenues avec les différents modèles.

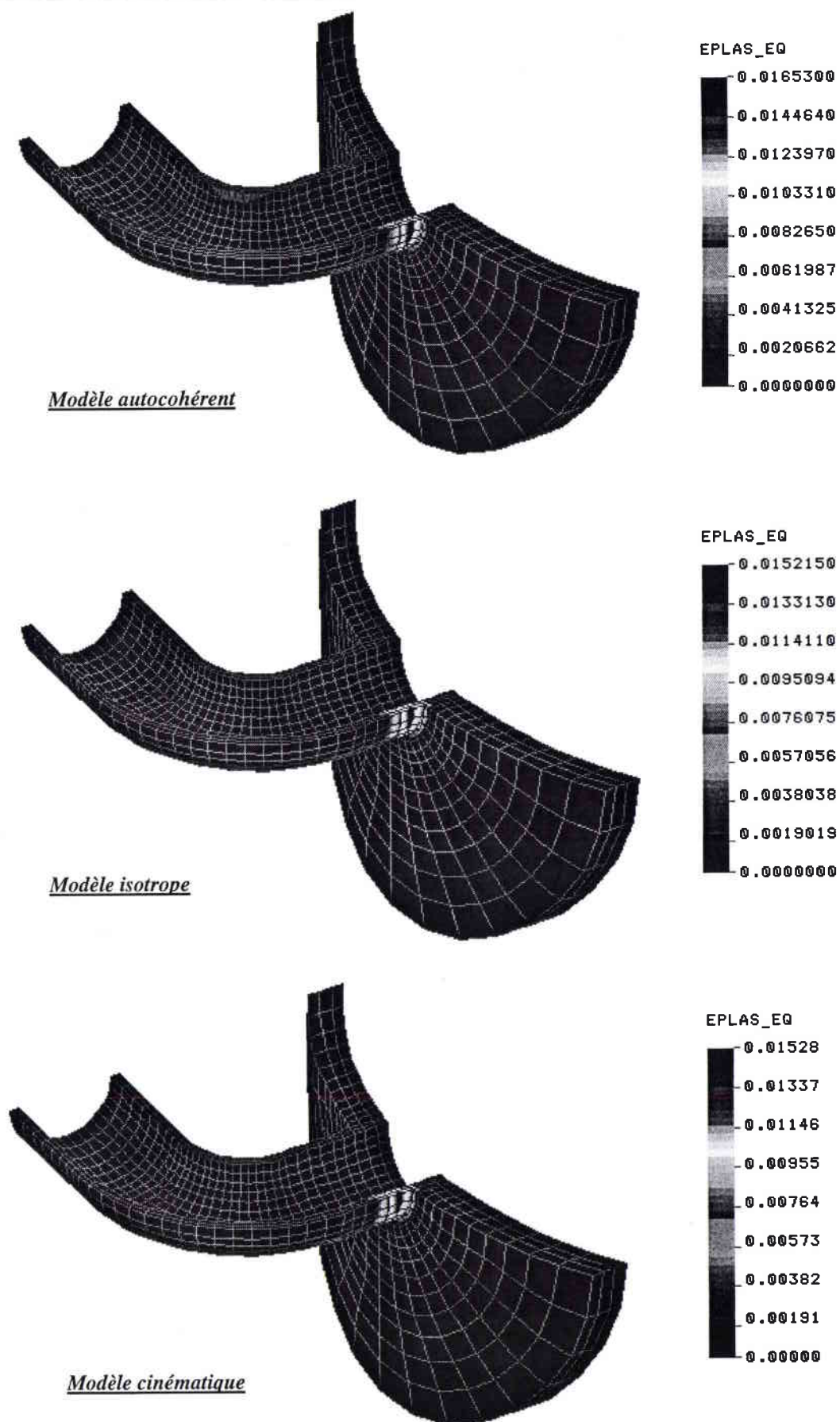


Figure V.24 : Distributions des déformations plastiques équivalentes obtenues avec les différents modèles.

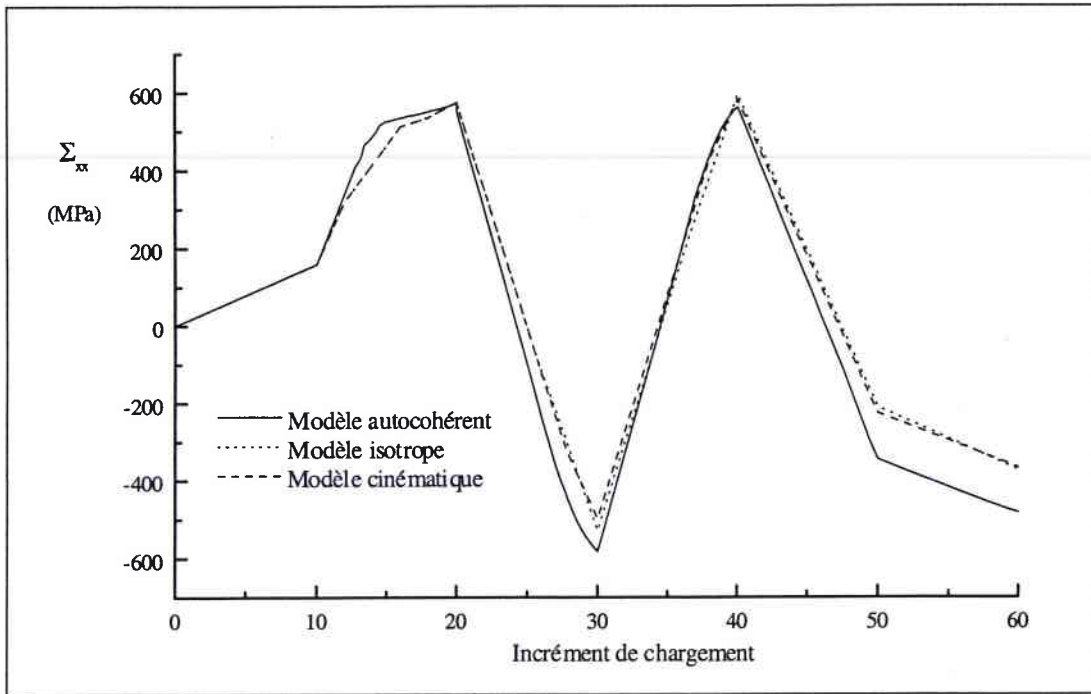


Figure V.25 : Evolution de la contrainte Σ_{xx} , obtenue par les différents modèles.

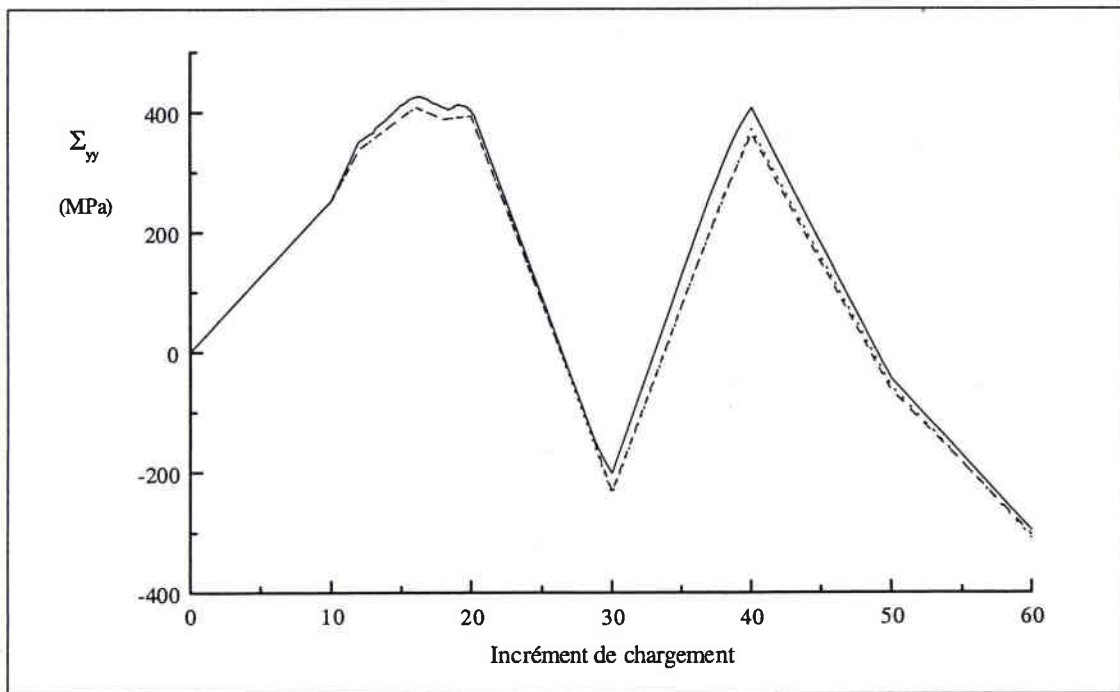


Figure V.26 : Evolution de la contrainte Σ_{yy} , obtenue par les différents modèles.

L'étude de l'évolution de la déformation plastique ε_{xx}^P , nous révèle, *figure V.27*, une différence entre les trois modèles, notamment lors de la compression. Dans l'exemple précédent, l'approche autocohérente est intermédiaire aux deux modèles phénoménologiques, ce qui n'est pas le cas ici. Ce changement est dû à la raison évoquée plus haut, et qui a pour origine des lois de comportement

initiales qui ne sont pas exactement identiques. L'évolution de déformation plastique reste, malgré tout, du même ordre de grandeur pour les différentes approches étudiées.

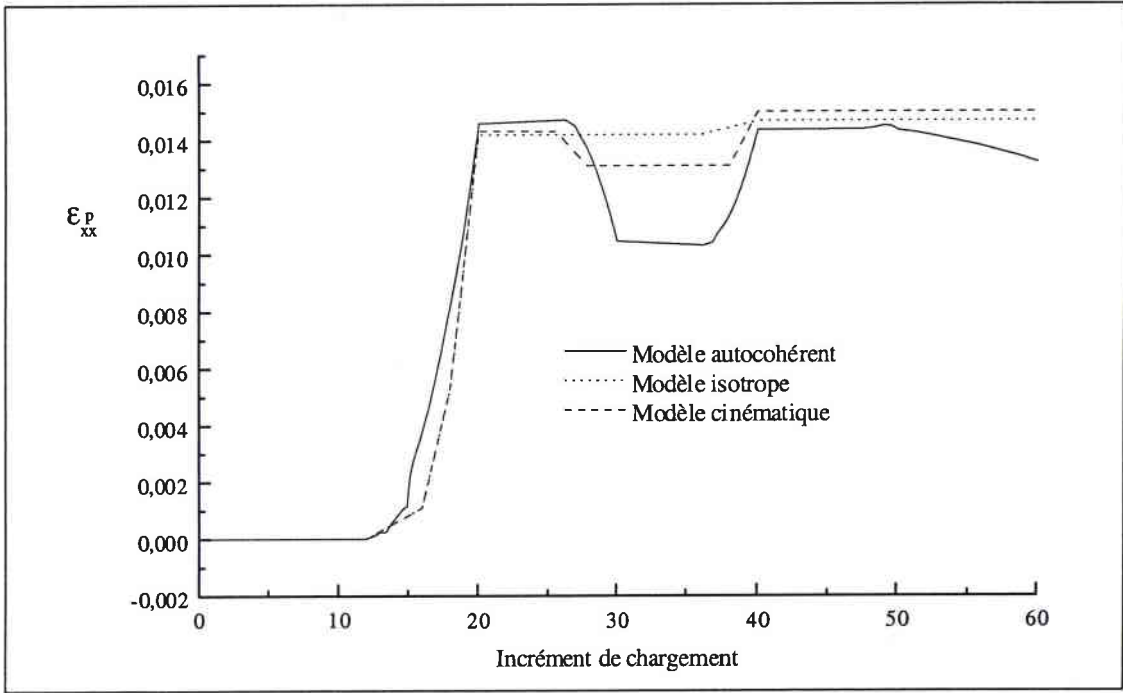


Figure V.27 : Evolution de la déformation plastique ϵ_{xx}^p , obtenue avec les différents modèles.

Les distributions de l'énergie stockée finale après déchargement, associée aux contraintes résiduelles d'ordre I, sont pratiquement identiques quel que soit le modèle utilisé, comme le montre la figure V.28. Ce dernier résultat nous confirme donc la validité du couplage proposé, qui modifie, tout au long du chargement, les lois de comportement des points de Gauss qui se plastifient. Cette démarche originale permet de réduire au maximum la taille du fichier associée aux variables microstructurales. Sur la figure V.29, nous avons représenté l'évolution du nombre de point Gauss "autocohérents" lors de la simulation. On observe une augmentation rapide lors de la mise sous charge, puis une stabilisation dans toute la suite du chargement. Il y a environ 1800 points d'intégrations qui se plastifient, ce qui nécessite une place mémoire de 56.2 Mo ($1800 \times 31.2 Ko$) pour le fichier de stockages des données relatives à la microstructure. Cette valeur est à comparer aux 395.3 Mo pour un couplage complet, ce qui représente un gain de plus de 85% en place mémoire.

Nous avons vu que le rapport des temps de calcul est de 20, entre un couplage autocohérent complet considérant 100 grains par points de Gauss, et une simulation phénoménologique. L'utilisation du schéma autocohérent uniquement pour les 1800 points d'intégration qui se plastifient (sur un total de 12672 points), abaisse ce rapport de temps à 3.7 $\left(20 \times \frac{1800}{12672} + 1 \times \frac{10872}{12672} \right)$, soit un gain d'environ 82%.

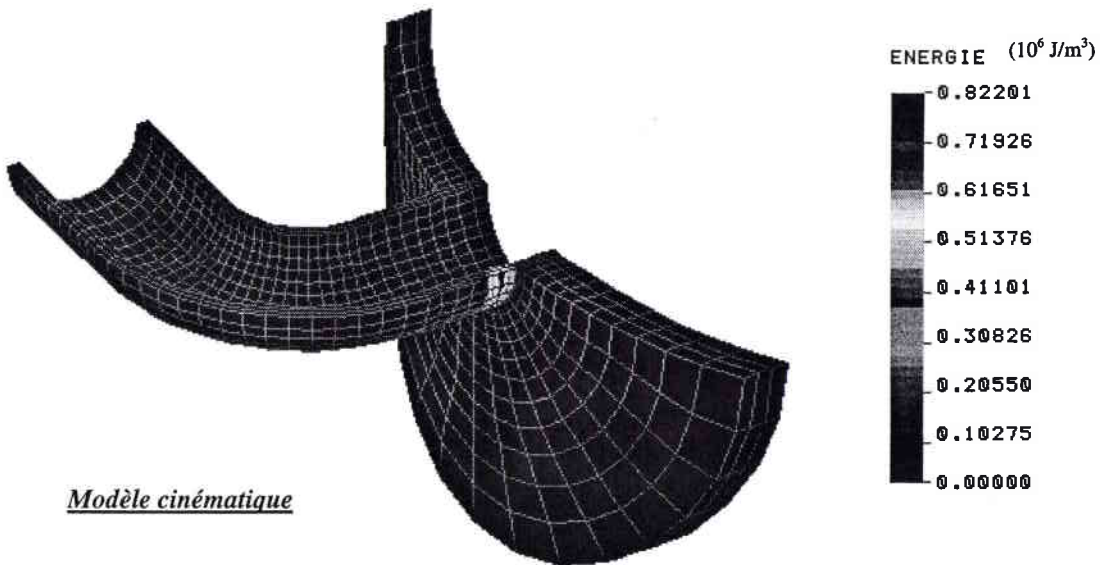
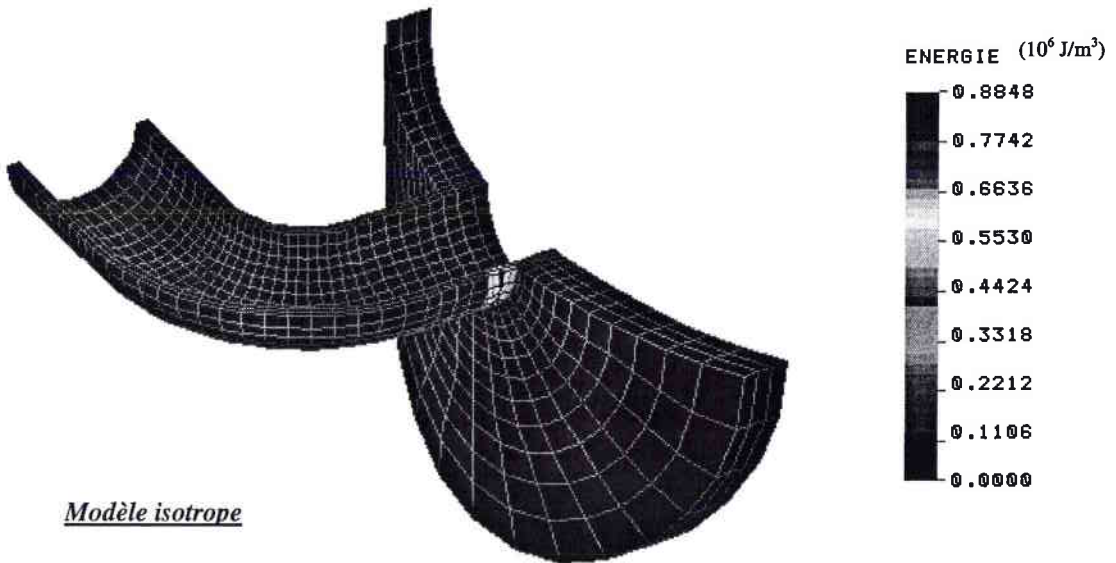
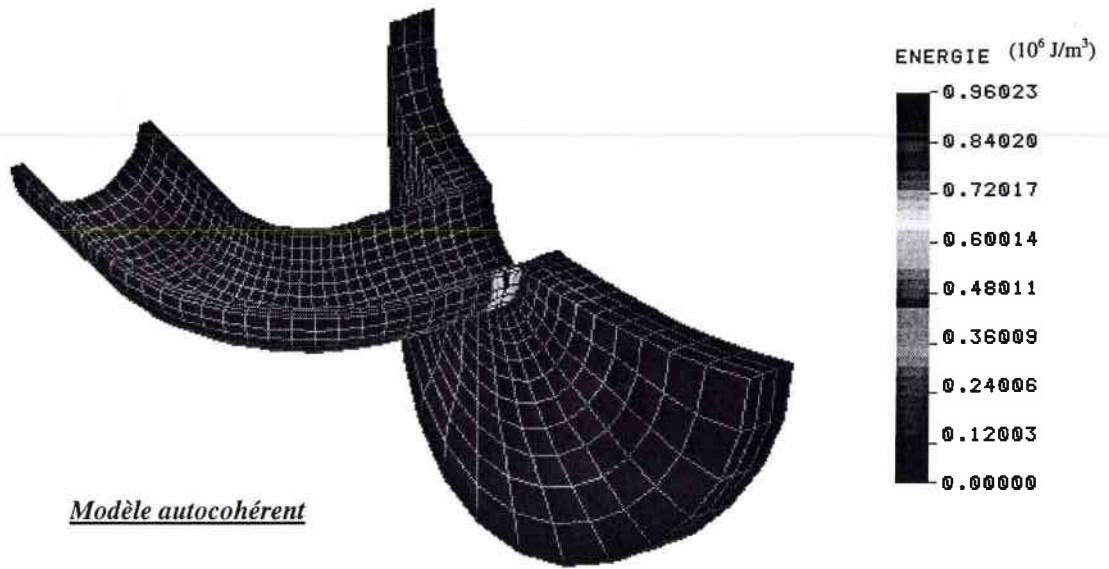


Figure V.28 : Distribution de l'énergie stockée associée aux contraintes résiduelles d'ordre I.

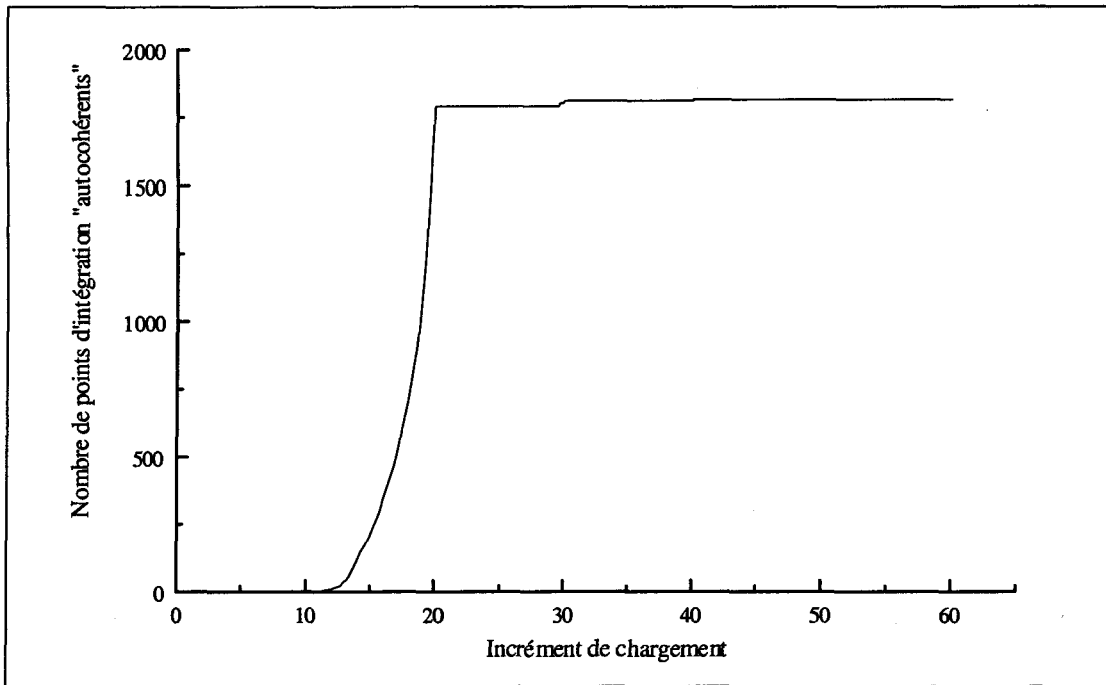


Figure V.29 : Evolution du nombre de points de Gauss "autocohérents" au cours du chargement.

V.4 – Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons étudié trois différents couplages d'une approche cristallographique avec un code de calcul de structures par éléments finis. Il a été mis en évidence qu'un couplage complet, c'est à dire un couplage dans lequel le comportement élastoplastique de tous les éléments est modélisé par un calcul polycristallin, a besoin d'une place mémoire importante sur le disque dur, et requiert un temps de calcul relativement long. Bien sur, ce problème est d'autant plus considérable que le nombre d'éléments est élevé. Mais ce type de couplage peut, dans certains cas, s'avérer indispensable, notamment pour la simulation d'un processus de formage d'une pièce (laminage, forgeage, etc.). Son utilisation devient problématique lorsque la structure est complexe, et qu'elle nécessite une discrétisation avec un nombre important d'éléments. C'est le cas de la plupart des problèmes étudiés en éléments finis, qui sont précisément destinés à ce genre de structures. Le couplage mixte y trouve alors son intérêt. En effet, d'une manière générale, la structure, de par son dimensionnement, est soumise en service, et pour une grande partie de son volume, à un état de contrainte appartenant au domaine élastique. Seules quelques singularités entraînant une concentration de contrainte sont à l'origine de l'existence de déformations

plastiques. Si la zone plastique est confinée à certains endroits de la structure, elle constitue aussi son point faible. C'est pourquoi, il est nécessaire d'avoir une analyse plus approfondie à cet endroit. Le couplage mixte apporte alors une solution en consacrant plus de temps aux calculs pour les zones sensibles de la structure. Mais la localisation exacte de la zone plastique, et surtout son étendue, est souvent délicate à déterminer a priori. Dans le dernier couplage proposé, il n'est pas nécessaire de définir, avant calcul, les éléments qui sont "autocohérents" ou "phénoménologiques". La mise en place du calcul autocohérent en un point de Gauss donné est réalisée automatiquement par le logiciel à partir d'un critère de plastification. On consacre donc un maximum de temps pour un minimum de points d'intégration, qui ont besoin d'avoir une description plus précise, et plus riche en informations, du comportement du matériau. La validation de ce couplage est faite par l'étude d'un problème complexe. On a ainsi mis en évidence les gains considérables obtenus, en terme de temps de calculs et de place mémoire occupée.

Références bibliographiques

- Anderson, R., G., Irons, B., M., Zienkiewicz, O., C., (1968), *Int. J. Solids and Struct.*, **4**, pp. 1031-1055.
- Bathias, C., Bailon, J. P., (1997), *La fatigue des matériaux et des structures*, 2^{ème} édition, Hermès.
- Cailletaud, G., Pilvin, P., (1994), *Revue Européenne des éléments finis*, Vol. 3 , **4**, pp. 515 - 541.
- Dawson, P., Beaudouin, A., Mathur, K., Sarma, G., (1994), *Revue Européenne des éléments finis*, Vol. 3 , **4**, pp. 543 - 571.
- Duchanois, G., Lipinski, P., Dess, J., Caesemaecker, F., (1992), *Calcul des contraintes résiduelles dans un appareil à paroi épaisse après traitement thermique local et épreuve hydraulique*, AFIAP, Paris.
- Desai, C., S., Abel, J., F., (1972), *An Introduction to the Finite Element Methode*, Van Nostrand Reinhold, New York.
- Franciosi, P., Hamel, A., Fougères, R., (1999), 20th Risø International Symposium, Roskilde, Denmark, pp. 333-339.
- Gallagher, R., H., (1975), *Finite Element Analysis-Fundamental*, Prentice Hall, New Jersey.
- Lipinski, P., Scacciatella, E., Zattarin, P., (1996), 3^{ème} conférence scientifique sur les travaux d'ingénieurs assistés par ordinateur, 11-14 décembre, Pologne.
- Norme A03-403, (1990), *Produits métalliques, Pratique des essais de fatigues oligocycliques*, ISSN 0335-3931, AFNOR.
- Norrie, D., H., De Vries, G., (1973), *The Finite Element Method-Fundamentals and Applications*, Academie Press, London.
- Owen, D., R., J., Hinton, E., (1980). *Finite Elements in Plasticity*, Departement of Civil Engineering University College of Swansa, UK.
- Scacciatella, E., Lipinski, P., Berveiller, M., Detraux, J.M., Horkay, F., (1991), 3^{ème} Congrès International, Plasticity 91, Elsevier Applied, pp. 659-662, Grenoble.
- Scacciatella, E., Lipinski, P., Berveiller, M., Detraux, J.M., Horkay, F., (1992), 13th Risø International Symposium on material Science, pp. 431-438, Roskilde, Denmark.
- Taylor, C., Davis, J., M., (1975), *Tidal Propagation and Dispersion*, Ch. 15, Wiley, London.
- Zienkiewicz, O., C., (1971), *The Finite Element Methode in Engineering Science*, Mc Graw-Hill, New York.
- Zienkiewicz, O., C., Owen, D. R. J., Phillips, D., V., Nayak, G., C., (1972), *Nucl. Eng. Des.*, **20**, pp. 507-541.

CONCLUSION GENERALE

Si la méthode des éléments finis constitue un outil fiable pour la simulation du comportement thermomécanique des structures, elle est fortement tributaire du caractère prédictif des lois introduites.

Les approches phénoménologiques ont la particularité d'assurer une exécution rapide des calculs. Ils fournissent aussi des résultats fiables, sous condition que le chargement suive un trajet relativement simple. En effet, lorsque celui-ci met à contribution l'évolution de la surface de plasticité, il est nécessaire d'utiliser un modèle qui prenne en compte la microstructure du matériau. La mise en place d'une approche à transition d'échelle est alors préférable. Néanmoins, le couplage exclusif d'un modèle polycristallin avec la méthode des éléments finis est rendu pratiquement inutilisable en raison de la hausse considérable des temps de calculs, mais aussi, et comme cela a été exposé, de la place mémoire. Au vu de ce constat, nous avons proposé, dans ce rapport, plusieurs améliorations.

La première amélioration a été réalisée au niveau du modèle polycristallin lui-même, pour deux points particuliers :

- ◆ L'efficacité de la méthode autocohérente est directement reliée au calcul de l'interaction qui existe entre un grain du polycristal et son milieu environnant. Cette interaction est associée à un tenseur, dans lequel la présence du tenseur de Green rend complexe son évaluation pour un milieu anisotrope. Dans ce cas, il est impossible de déterminer analytiquement ce tenseur dont l'expression est sous forme d'intégrales doubles. Son calcul nécessite alors de mettre en place une procédure d'évaluation numérique. Dans le modèle proposé, nous avons développé un nouvel algorithme d'approximation d'intégrales doubles, basé sur un développement en série de Fourier des fonctions à intégrer. Les résultats montrent que cela permet de diminuer notablement les temps de calcul de ce tenseur, sans perte de précision.

- ◆ Dans ce travail, le phénomène physique pris en compte pour décrire la déformation plastique est le glissement des plans cristallographiques. Le mécanisme de déplacement et de stockage des dislocations est représenté, de façon homogène dans tout le monocristal, par l'évolution des cissions critiques, définie à partir de la matrice d'écrouissage et du taux de glissement plastique. En considérant le glissement cristallographique multiple, il est nécessaire de répertorier toutes les combinaisons potentiellement actives afin de sélectionner celle qui permet d'avoir une énergie de déformation minimale. Cet inventaire est à l'origine d'une consommation excessive de temps. C'est pourquoi nous proposons un nouveau critère de sélection des systèmes amenés à être activés. Dans l'utilisation de ce critère, nous supposons que le glissement s'effectue, pendant une courte période, uniquement sur le système le plus sollicité, c'est à dire pour lequel la différence entre la

contrainte projetée et la cission critique est maximale. L'activation de ce système permet alors de le décharger partiellement, et offre la possibilité à un autre système de s'activer. Le processus est reproduit jusqu'au moment où tous les systèmes de glissements sont déchargés, constituant ainsi la combinaison recherchée. L'intérêt de la méthode est vérifié non seulement au niveau du temps de calcul considérablement diminué, mais aussi pour la précision des résultats, car elle fournit une écriture plus simple des équations.

Le modèle ainsi développé possède donc une plus grande disposition pour le couplage avec la méthode des éléments finis, notamment grâce à l'amélioration de la vitesse d'exécution du programme associé. Dans le code de calcul des structures 3D que nous avons développé, nous intégrons le schéma autocohérent proposé. On observe alors une convergence plus rapide de la méthode des éléments finis. En effet, les résultats obtenus nous révèlent des forces résiduelles plus faibles, pour chaque incrémentation du chargement. Cependant, malgré les progrès réalisés, l'utilisation d'un tel couplage reste lourde. En effet, les approches à transition d'échelle ne peuvent, sur le plan des temps de calcul, rivaliser avec les méthodes phénoménologiques. D'autres améliorations doivent donc être apportées au niveau de la construction du code d'éléments finis.

Une solution à ce problème consiste à mixer, dans le couplage, les deux approches, polycristallines et phénoménologiques. Une étiquette est attribuée à chaque élément du maillage, permettant d'identifier la loi de comportement associée à cet élément. On utilise donc du temps de calcul supplémentaire, uniquement là où on en a réellement besoin, c'est à dire pour des éléments situés aux endroits stratégiques de la structure. Dans ce travail, les éléments dont les déformations restent purement élastiques, sont associés à une loi de comportement phénoménologique. La difficulté réside alors dans la détermination, a priori, des éléments qui se plastifient, et nécessitant alors un calcul autocohérent. Dans la dernière amélioration du couplage, on met en place un critère de plastification. Cette modification permet de ne plus associer le modèle polycristallin à un élément particulier, mais directement au point de Gauss. On a ainsi la possibilité de lier, par exemple, le schéma autocohérent **uniquement** à un point d'intégration de l'élément. Les résultats ont mis en évidence l'efficacité d'un tel couplage. Les temps de calcul, par rapport à l'utilisation de lois phénoménologiques, sont désormais acceptables. La place mémoire, nécessaire au stockage des données relatives à la microstructure, a été considérablement diminuée.

Dans ce travail, nous avons validé le couplage d'une approche cristallographique avec un code de calculs de structures en éléments finis. Une amélioration du modèle autocohérent implanté offre la possibilité d'avoir une analyse encore plus précise du comportement réel des structures. L'écriture en grandes déformations du schéma autocohérent permet de prendre en compte l'écroutissage non-linéaire (par une évolution de la matrice d'écroutissage), ainsi que de la modification de la forme des grains du polycristal, au cours du chargement. Une modélisation plus appropriée du mouvement, et surtout du stockage des dislocations sous formes de cellules, est indispensable pour considérer l'influence de la taille des grains sur le comportement plastique du matériau, et que l'on néglige totalement ici. Enfin, la mise en place d'un modèle d'endommagement (initiation et évolution des microfissures) permet d'achever la construction du modèle, dans le but de déterminer la durée de vie d'une structure métallique.

Une amélioration du couplage peut aussi être réalisée, lorsque les points de Gauss "phénoménologiques" passent en calcul autocohérent, en ne considérant uniquement les points qui ont les déformations plastiques les plus importantes. Dans ce cas, les points d'intégration dont la déformation plastique est faible (par rapport aux autres points), sont modélisés par une loi phénoménologique élastoplastique.

ANNEXE

DETERMINATION DES

TENSEURS D'INTERACTION

Les expressions des tenseurs d'interaction T^{II} et T^{IJ} sont établies au moyen du calcul de la transformée de Fourier du tenseur de Green. Cette technique a été proposée par Kneer (1965), reprise par Mura (1971) pour déterminer T^{II} , ainsi que par Fassi-Fehri (1985) afin de spécifier T^{IJ} . On présente ici les différentes étapes de calcul du tenseur T^{II} , et l'expression permettant de définir T^{IJ} .

A.1 - Détermination de T^{II}

Partons de la transformée de Fourier du tenseur de Green :

$$\tilde{G}_{km}(k) = \int_V G_{km}(r) e^{i k_i r_i} dV \quad (A.1)$$

où k est le vecteur conjugué de r .

La transformée de Fourier inverse est donnée par :

$$G_{km}(r) = \frac{1}{8 \pi^3} \int_{V_k} \tilde{G}_{km}(k) e^{-i k_i r_i} dV_k \quad (A.2)$$

En dérivant (A.2) deux fois, on obtient :

$$G_{km,lj}(r) = \frac{1}{8 \pi^3} \int_{V_k} -k_l k_j \tilde{G}_{km}(k) e^{-i k_i r_i} dV_k \quad (A.3)$$

On introduit ensuite la transformée de Fourier de la fonction de Dirac :

$$\tilde{\delta}(k) = \int_V \delta(r) e^{i k_i r_i} dV = 1 \quad (A.4)$$

et sa transformée inverse :

$$\delta(r) = \frac{1}{8 \pi^3} \int_{V_k} e^{-i k_i r_i} dV_k \quad (A.5)$$

En reportant les équations (A.3) et (A.5) dans la relation qui définit le tenseur de Green (III.44), on a, après simplification :

$$L_{ijkl}^0 \tilde{G}_{km}(k) k_i k_l = \delta_{jm} \quad (A.6)$$

On pose maintenant :

$$t_{klmj}^{II} = -\frac{1}{V_I} \int_{V_I} \int_{V_I} G_{km,lj}(r - r') dV_I' dV_I \quad (A.7)$$

L'expression du tenseur d'interaction (III.64) devient alors :

$$T_{klmj}^{II} = \frac{I}{2} (t_{klmj}^{II} + t_{lkmj}^{II}) \quad (\text{A.8})$$

En reportant (A.3) dans (A.7), on trouve :

$$t_{klmj}^{II} = \frac{I}{8 \pi^3 V_I} \int_{V_I} \int_{V_I} \int_{V_k} k_l k_j \tilde{G}_{km}(k) e^{-i k_i r_i} e^{i k_i r'_i} dV_k dV'_I dV_I \quad (\text{A.9})$$

Par la suite, on considère l'inclusion comme étant ellipsoïdale, de demi-axes a , b et c . On se place alors, dans le repère lié à l'inclusion, dans lequel le vecteur k a pour coordonnées :

$$k_i = k \chi_i \quad (\text{A.10})$$

où :

$$\chi_1 = \sin \theta \cos \varphi \quad \chi_2 = \frac{a}{b} \sin \theta \sin \varphi \quad \chi_3 = \frac{a}{c} \cos \theta \quad (\text{A.11})$$

En insérant la relation (A.10) dans (A.6), on obtient :

$$k^2 \tilde{G}_{jk}(k) = \left(L_{ijkl}^0 \chi_i \chi_l \right)^{-1} \quad (\text{A.12})$$

Par ailleurs, l'élément de volume V_k peut se réécrire :

$$dV_k = k^2 \sin \theta d\theta d\varphi dk \quad (\text{A.13})$$

Finalement, l'équation (A.9) devient, voir par exemple Fassi-Fehri (1985), après calcul :

$$t_{klmj}^{II} = \frac{I}{4 \pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \chi_l \chi_j k^2 \tilde{G}_{km}(k) \sin \theta d\varphi d\theta \quad (\text{A.14})$$

Dans le chapitre IV, on a vu que la détermination analytique de l'intégrale double définie dans la relation (A.14) ne peut être obtenue que dans le cas d'un milieu isotrope, pour des inclusions de géométries bien précises. Pour toutes autres configurations, il est nécessaire d'utiliser une procédure d'évaluation numérique.

A.2 - Détermination de T^{IJ}

On se place maintenant dans le cadre de deux inclusions situées dans un milieu anisotrope, dont le vecteur reliant les centres est R^0 , comme représenté sur la figure A.1.

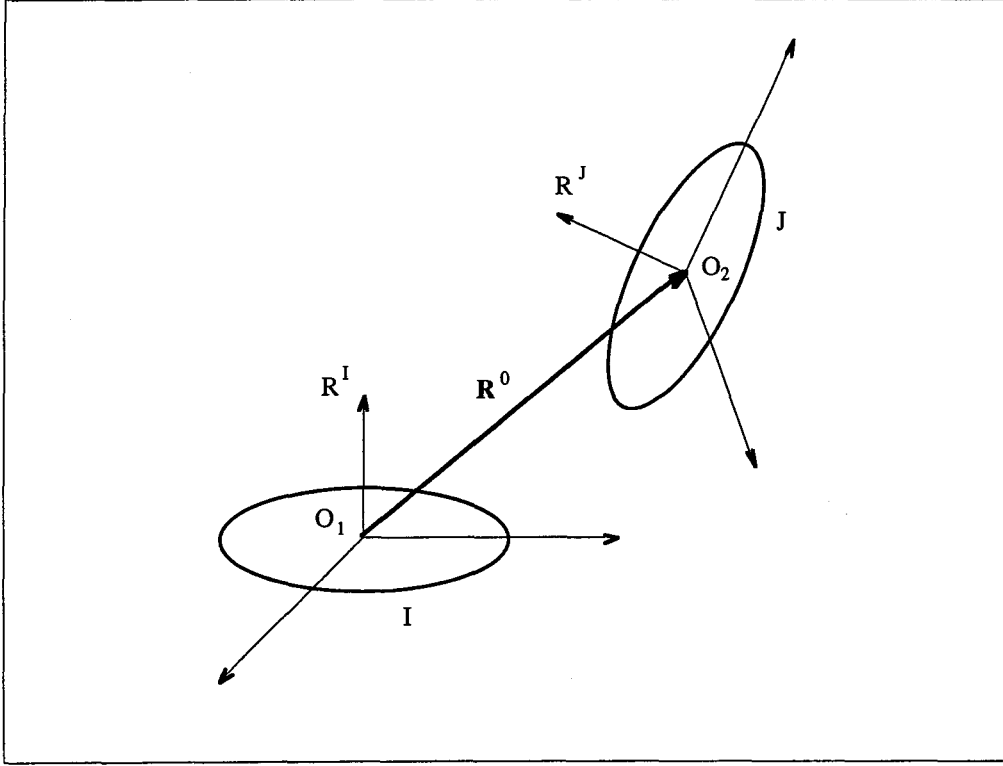


Figure A.1 : Représentation schématique de deux inclusions ellipsoïdales plongées dans un milieu isotrope.

Alors l'expression du tenseur d'interaction est donné par :

$$T_{klmj}^{IJ} = \frac{1}{2} (t_{klmj}^{IJ} + t_{ikmj}^{IJ}) \quad (\text{A.15})$$

où :

$$t_{klmj}^{IJ} = \frac{9}{8 \pi^3} V_J \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \chi_l \chi_j k^2 \tilde{G}_{km}(k) \sin \theta F(\theta, \varphi) d\varphi d\theta \quad (\text{A.16})$$

Les composantes χ_i sont définies par :

$$\begin{cases} \chi_1 = \sin \theta \cos \varphi \\ \chi_2 = \sin \theta \sin \varphi \\ \chi_3 = \cos \theta \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

Les différentes étapes de calcul peuvent être trouvées dans la thèse de Fassi-Fehri (1985). L'expression de la fonction $F(\theta, \varphi)$ est donnée par :

$$F(\theta, \varphi) = \frac{\pi}{48} \frac{f_1 + f_2 + f_3 + f_4}{(a b)^3} \quad (\text{A.18})$$

avec :

$$\begin{cases} f_1 = |\alpha| [-\alpha^2 + 3(a+b)\alpha - 6ab] \\ f_2 = |\beta| [\beta^2 + 3(a-b)\beta - 6ab] \\ f_3 = |\gamma| [\gamma^2 - 3(a-b)\gamma - 6ab] \\ f_4 = |\delta| [-\delta^2 + 3(a+b)\delta - 6ab] \end{cases} \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{cases} a = (a_1^2 \chi_1^2 + b_1^2 \chi_2^2 + c_1^2 \chi_3^2)^{1/2} \\ b = [a_2^2 (\alpha_{1j} \chi_j)^2 + b_2^2 (\alpha_{2j} \chi_j)^2 + c_2^2 (\alpha_{3j} \chi_j)^2]^{1/2} \\ c = \chi_1 R_1^0 + \chi_2 R_2^0 + \chi_3 R_3^0 \end{cases} \quad (\text{A.20})$$

où :

$$\begin{cases} \alpha = a + b - c \\ \beta = -a + b + c \\ \gamma = a - b + c \\ \delta = a + b + c \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

a_1, b_1, c_1 et a_2, b_2, c_2 représentent respectivement les dimensions des inclusions I et J . R_1^0, R_2^0 et R_3^0 sont les composantes du vecteur R^0 , et α_{ij} représente les composantes de la matrice de passage entre les deux repères R^I et R^J , liés aux inclusions, voir *figure A.1*. Soient ϕ_1, ψ et ϕ_2 les angles d'Euler qui orientent le repère R^J par rapport à R^I , les composantes de la matrice de passage sont alors :

$$\begin{cases} \alpha_{11} = \cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \psi \\ \alpha_{12} = \sin \phi_1 \cos \phi_2 + \cos \phi_1 \sin \phi_2 \cos \psi \\ \alpha_{13} = \sin \psi \sin \phi_2 \\ \alpha_{21} = -\cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \psi \\ \alpha_{22} = -\sin \phi_1 \sin \phi_2 + \cos \phi_1 \cos \phi_2 \cos \psi \end{cases} \quad \begin{cases} \alpha_{23} = \sin \psi \cos \phi_2 \\ \alpha_{31} = \sin \phi_1 \sin \psi \\ \alpha_{32} = -\cos \phi_1 \sin \psi \\ \alpha_{33} = \cos \psi \end{cases} \quad (\text{A.22})$$

Références bibliographiques

Fassi-Fehri, O., (1985), Thèse, Université de Metz.

Kneer, G., (1965), *Physica Status Solidi*, 2, p. 825.

Mura, T., (1971), *J. Appl. Mech.*, 38, pp. 865-868.

RESUME

L'estimation de la réponse élastoplastique d'une structure sollicitée thermomécaniquement peut être réalisée à l'aide d'un code de calcul d'éléments finis. Dans le code que nous développons, nous introduisons une modélisation polycristalline basée sur une approche autocohérente, ce qui permet d'évaluer le comportement élastoplastique d'un matériau soumis à un chargement complexe, tel que la tenue en fatigue ou l'écoulement de la matière lors d'une opération de mise en forme. La méthodologie que nous proposons est d'associer chaque point d'intégration de l'élément fini à un ensemble de grains monocristallins représentatif de la microstructure du matériau. Le comportement macroscopique de ces points de Gauss est déterminé à partir des relations élastoplastiques des grains grâce à une opération de transition d'échelle. Au niveau microscopique, la plasticité du monocristal est décrite à l'aide du mécanisme de glissements cristallographiques, pour lequel nous proposons un nouveau critère de sélection des systèmes actifs. La mise en place des équations d'équilibre, de compatibilités et des relations du comportement ainsi que des conditions aux limites, pour un matériau microhétérogène, permet d'établir un équation intégrale cinématique. La résolution de cette équation par la méthode autocohérente conduit aux relations de transition d'échelle et permet de déterminer l'évolution de la microstructure au cours de la déformation (orientations cristallographiques, contraintes internes, ...). Nous proposons un nouvel algorithme de calcul numérique des tenseurs d'interaction introduits lors de cette résolution.

La réponse élastoplastique de la structure sollicitée est obtenue par la méthode des éléments finis, dans laquelle le principe des puissances virtuelles est appliqué à chaque élément dans le cadre des petites transformations. Dans le code que nous proposons, seuls quelques éléments situés aux endroits "stratégiques" de la structure sont couplés à la méthode autocohérente. Les autres éléments restent liés à une loi phénoménologique, ce qui permet de ne pas augmenter inutilement les temps de calculs, ainsi que la place mémoire nécessaire au stockage des données relatives aux microstructures de chacun des points de Gauss. On met en évidence les capacités du code au travers de simulations simples de problèmes tridimensionnels.

Mots-clés : *élastoplasticité - modèle autocohérent - éléments finis - glissements cristallographiques - tenseurs d'interaction - petites transformations.*

ABSTRACT

Elastoplastic response of a mechanically requested structure can be carried out using a finite elements code. Into the code that we develop, we introduce a polycrystalline modelling based on a self-consistent approach, which makes it possible to evaluate the elastoplastic behaviour of a material subjected to a complex loading, such as response during a fatigue test or flow into a forming process. Methodology that we propose is to associate each integration point of the finite element with a whole of single crystal representative of the material's microstructure. Macroscopic behaviour of these Gauss' points is given starting from local elastoplastic relations thanks to a scale transition operation. At the microscopic level, plasticity of the single crystal is described by a crystallographic slip mechanism, for which we propose a new criterion of active systems selection. With compatibility relations and equilibrium equations as well as boundary conditions, for a microheterogeneous material, we establish a kinematic integral equation. Solution of this equation by the self-consistent method leads to scale transition relations and makes it possible to determine evolution of the microstructure during the deformation (crystallographic orientations, internal stresses...). We propose a new numerical calculation algorithm of interaction tensors introduced at the time of this resolution.

The elastoplastic response of the structure is obtained by the finite elements method, in which the principle of the virtual work is applied to each element within the framework of the small transformations. In the code that we propose, only some elements located at the "strategic" places of the structure are coupled with the self-consistent method and the other elements are related to a phenomenological law. Then computing time is not unnecessarily increased, as well as the place memory necessary to the data storage relating to the microstructures of each Gauss' point. One highlights code's capacities through simple simulations of three-dimensional problems.

Key words : *elastoplasticity - self-consistent model - finite elements - crystallographic glide - interaction tensors - small transformations.*