Modélisation du comportement mécanique

Cette partie discute des approches de modélisation du comportement de matériaux polycristallins. D'importants travaux ont été menés dans les domaines de la plasticité dite phénoménologique et de la plasticité cristalline depuis près d'un siècle maintenant. Ils couvrent de nombreux aspects dont le formalisme cinématique des grandes transformations, les lois de comportement, les lois d'écrouissage phénoménologique et à base physique.

2.1 Eléments de mécanique des milieux continus

2.1.1 Cinématique des grandes transformations

L'espace euclidien tridimensionnel est muni d'un repère cartésien fixe d'origine O et de vecteurs de base ($\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3$). On considère un corps déformable constitué de points matériels appelés particules. Le corps est dans une position dite configuration de référence Ω_o à un instant initial t_o ; sous l'action de sollicitations extérieures, le corps est mis en mouvement, se déforme et se retrouve dans la configuration dite courante Ω_t à un instant t comme illustré sur la Figure 2.1.



FIGURE 2.1: Mouvement d'un corps déformable de la configuration de référence à la configuration courante.

Examinons le mouvement d'une particule A choisie arbitrairement. Sa position en configuration initiale est donnée par le vecteur \underline{X} et sa position en configuration courante par \underline{x} . Le mouvement de A sera analysé en description lagrangienne plutôt qu'en description eulérienne plus adaptée aux écoulements de fluides.

Ainsi une variation infinité simale de la position de A dans Ω_t se formalise par rapport à Ω_o comme suit :

$$\underline{dx} = \frac{\partial \underline{x}}{\partial \underline{X}} \underline{dX} \tag{2.1}$$

De cette relation, on définit le gradient de la transformation F par :

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \underline{x}}{\partial \underline{X}} \tag{2.2}$$

Le tenseur \mathbf{F} caractérise de façon locale la transformation et porte l'information sur la déformation du voisinage du point matériel A. Cette information comporte une déformation pure et une rotation. Ainsi, le gradient de la transformation \mathbf{F} admet une décomposition polaire qui s'écrit de manière unique :

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{R} \tag{2.3}$$

 \mathbf{R} est un tenseur orthogonal qui représente les *rotations de corps rigide*. U et \mathbf{V} sont respectivement les tenseurs droit et gauche de *déformation pure*; ils sont symétriques et

définis positifs.

Lors d'un mouvement de corps rigide, le solide ne subit aucune déformation pure et on a de fait les égalités $\mathbf{U} = \mathbf{I}$ et $\mathbf{F} = \mathbf{R}$ où \mathbf{I} est le tenseur identité d'ordre deux. Afin de garantir une déformation nulle dans de tels cas de figure, il est classique de définir des mesures de déformations à partir de \mathbf{F} , \mathbf{U} ou \mathbf{V} et il en existe un très grand nombre. Le tenseur de déformation de Green-Lagrange est défini sur la configuration de référence par :

$$\mathbf{E}_{L} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}^{T} \cdot \mathbf{F} - \mathbf{I} \right) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{U}^{2} - \mathbf{I} \right)$$
(2.4)

La mesure de déformation logarithmique ou mesure de Hencky s'écrit sur la configuration de référence :

$$\mathbf{E}_{H} = \ln\left(\mathbf{U}\right) \tag{2.5}$$

La dimension temporelle entre bien évidemment dans la représentation du mouvement et la vitesse particulaire s'écrit $\underline{v} = \frac{\partial \underline{x}}{\partial t}$. On peut alors définir le gradient de vitesses de déformation par :

$$\mathbf{L} = \frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{x}} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} \tag{2.6}$$

Il se décompose en une partie symétrique, la vitesse (ou taux) de déformation \mathbf{D} et une partie antisymétrique la vorticité ou spin \mathbf{W} :

$$\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W} \text{ avec } \mathbf{D} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T \right) \text{ et } \mathbf{W} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T \right)$$
(2.7)

Le tenseur spin **W** peut être interprété physiquement comme la vitesse de rotation des axes principaux du taux de déformation.

2.1.2 Mesures de contrainte

Il existe dans la littérature plusieurs définitions du tenseur des contraintes. Il convient de faire un choix judicieux de la mesure appropriée aux effets que l'on cherche à représenter et/ou concordante avec les outils numériques et expérimentaux dont on dispose. En particulier, les lois de comportement associent des paires contrainte-déformation bien spécifiques. Les expressions les plus courantes sont les formes eulériennes τ tenseur de Kirchhoff et σ tenseur de Cauchy, mixtes **B** premier tenseur de Piola-Kirchhoff et lagrangiennes π second tenseur de Piola-Kirchhoff.

Les tenseurs σ et **B** ont une signification physique en ce qu'ils caractérisent directement les efforts appliqués. En effet, considérons (Figure 2.2) dans une configuration de référence, un élément de surface d'aire dS et de normale <u>N</u>. Après déformation, donc en configuration courante, cet élément occupe une aire ds et a <u>n</u> pour normale unitaire.



FIGURE 2.2: Représentation des configurations courante et de référence.

Si on suppose qu'en configuration courante, il s'exerce sur l'élément de surface une force df, alors on aura les expressions suivantes :

$$df = \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} ds \quad \text{et} \quad df = \mathbf{B} \cdot \underline{N} dS$$
 (2.8)

En clair, par définition σ est une mesure de la force par unité de surface dans l'état déformé et **B** une mesure de la force appliquée au corps déformé par unité de surface non déformée.

Le tenseur de Kirchhoff τ est relié à celui de Cauchy par $\tau = J\sigma$ où J est le déterminant du gradient de la transformation \mathbf{F} . Son utilisation permet d'alléger les formulations et il possède comme le tenseur de Cauchy la propriété de symétrie. En revanche, le premier tenseur de Piola-Kirchhoff n'est pas en général symétrique, ce qui peut rendre complexe son utilisation dans le développement et l'implantation numérique de modèles. Le second tenseur de Piola-Kirchhoff π est, lui, symétrique et lagrangien. C'est une mesure de la force <u>dg</u>, résultat du transport de <u>df</u> en configuration de référence, par unité de surface non déformée. Il s'écrit :

$$\boldsymbol{\pi} = J \mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-T} \tag{2.9}$$

2.1.3 Lois de comportement, hyper et hypoélasticité

Nous nous intéressons ici au comportement à froid et négligerons par conséquent les effets thermiques. Dans un tel cadre, une loi de comportement est une relation qui définit la contrainte en fonction de la déformation et, éventuellement, leurs vitesses. C'est une relation physique qui ne doit pas varier d'un référentiel à l'autre. En d'autres termes, les entités qui servent à écrire les lois de comportement doivent être objectives c'est-à-dire invariantes par rapport à un changement de référentiel. L'hyperélasticité et l'hypoélasticité sont deux approches couramment employées pour formuler une loi de comportement.

Les modèles hyperélastiques sont basés sur les lois de la thermodynamique (voir par exemple (Lemaitre et Chaboche, 2004)). La loi de comportement dérive d'un potentiel thermodynamique qui est formalisé comme une densité d'énergie de déformation. Initialement développée pour décrire le comportement de matériaux qui admettent des taux importants de déformations élastiques (caoutchouc, polymères), l'approche hyperélastique a été étendue à la plasticité des métaux par (Simo et Ortiz, 1985). Les fondements thermodynamiques de ces modèles sont solides et la formulation est matérielle (établie sur la configuration de référence) et de fait objective.

Si on suppose une densité d'énergie libre de Helmholtz Ψ , alors la loi de comportement s'écrit :

$$\boldsymbol{\pi} = 2 \frac{\partial \boldsymbol{\Psi}}{\partial \mathbf{U}^2} \tag{2.10}$$

Ces modèles sont toutefois relativement complexes à mettre en oeuvre et la définition du potentiel thermodynamique sous-jacent peut s'avérer délicate.

L'hypoélasticité peut être perçue comme une analogie, dans le cadre des grandes transformations, de la théorie des petites déformations. La décomposition additive de la vitesse de déformation en parties élastique et plastique est notamment reprise du formalisme de la théorie des petites déformations. La loi de comportement est alors formulée de manière incrémentale entre des taux de déformation et de contrainte. L'absence de fondements thermodynamiques peut entraîner en grandes déformations élastiques une non conservation de l'énergie et de la dissipation en l'absence d'écoulement plastique. Cette possibilité limite l'emploi des modèles hypoélastiques à certains matériaux tels les métaux qui présentent de très faibles déformations élastiques. Outre ces limitations, la formulation de modèles hypoélastiques requiert l'utilisation de grandeurs objectives. En effet, les non linéarités géométriques qui surviennent en grandes transformations peuvent influer sur la représentation du comportement dans un cadre non adapté. Dans le cas illustré sur la Figure 2.3, une barre est soumise à un instant initial à un état de contraintes uniaxial selon l'axe \underline{x}_1 . Elle subit ensuite une rotation pure qui l'aligne sur l'axe \underline{x}_2 à un instant final.

Etudions l'évolution du tenseur de contraintes de Cauchy σ exprimé dans le repère fixe



FIGURE 2.3: Rotation de corps rigide d'une barre soumise à un état de contraintes.

 $(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$; à l'instant initial, la seule composante de σ sera σ_{11} et à l'instant final elle sera σ_{22} . On remarque qu'entre les deux instants, $\dot{\sigma}_{11} \neq 0$ et $\dot{\sigma}_{22} \neq 0$ ce qui ne correspond pas à la réalité physique! L'état de contraintes dans le matériau n'a pas changé, celui ci étant soumis à un mouvement de corps rigide. Le tenseur de contrainte de Cauchy exprimé dans le repère fixe n'est donc pas incrémentalement objectif. Il est nécessaire d'utiliser des entités objectives *et* incrémentalement objectives pour décrire les lois de comportement.

L'objectivité incrémentale est généralement obtenue de trois manières (voir (Sidoroff, 1982), (Simo et Hughes, 1998)).

2.1.3.1 Le transport convectif ou pull-back

On utilise des transformations tensorielles, en l'occurence le gradient de la transformation, pour projeter des tenseurs incrémentalement non objectifs vers la configuration de référence où les quantités tensorielles sont matérielles et de fait objectives. Ainsi en partant du tenseur de contraintes de Cauchy σ , on aboutit dans la configuration de référence au second tenseur de Piola-Kirchhoff par la transformation suivante :

$$\boldsymbol{\pi} = J \mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-T} \tag{2.11}$$

En appliquant cette transformation à une loi de comportement formulée en σ , on obtient une expression, dans la configuration de référence, qui est objective.

2.1.3.2 La construction de dérivées objectives sur la configuration courante

On dérive les tenseurs après les avoir transporté vers un référentiel qui suit la rotation du milieu continu et on les ramène dans la configuration courante fixe. Soit \mathbf{Q} la transformation orthogonale qui permet de passer vers le repère choisi; une dérivée objective de $\boldsymbol{\sigma}$ s'écrira :

$$\stackrel{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{Q}^T \cdot \frac{d}{dt} \left(\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{Q}^T \right) \cdot \mathbf{Q}$$
(2.12)

Selon le référentiel choisi, on distingue plusieurs dérivées objectives.

La dérivée de Truesdell, dérivée convective introduite par Truesdell en exploitant un transport sur la configuration de référence plutôt qu'un référentiel tournant. Elle s'écrit comme le pull-back (2.11) rapporté en configuration courante :

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}}^{TR} = \frac{1}{J} \mathbf{F} \cdot \frac{d}{dt} \left(J \mathbf{F}^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}^{-T} \right) \cdot \mathbf{F}^{T}, \qquad (2.13)$$

ce qui donne après développement :

$$\boldsymbol{\sigma}^{TR} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}^{T} + \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr}(\mathbf{L})$$
(2.14)

La dérivée de Zaremba-Jaumann-Noll couramment nommée dérivée de Jaumann ou dérivée corotationnelle : le référentiel corotationnel est choisi comme celui pour lequel les axes principaux de la vitesse de déformation paraissent fixes. En d'autres termes, il tourne à la même vitesse que le spin W. Considérons un changement de repère orthonormé sur notre particule A tel que :

$$\bar{\underline{x}} = \underline{c}(t) + \mathbf{Q}(t) \cdot \underline{x} \tag{2.15}$$

En exploitant cette expression et les relations cinématiques (2.2), (2.6) et (2.7) on montre que le spin s'écrit dans le nouveau référentiel :

$$\bar{\mathbf{W}} = \mathbf{Q} \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{Q}^T + \boldsymbol{\omega}, \qquad (2.16)$$

où $\boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{Q}} \cdot \mathbf{Q}^T$ est la vitesse de rotation relative des deux référentiels. En annulant le spin dans le nouveau référentiel, on obtient la transformation qui génère le reférentiel corotationnel par intégration de :

$$\dot{\mathbf{Q}}^T \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{W} \tag{2.17}$$

On suppose généralement qu'à l'instant initial le référentiel corotationnel coïncide avec le référentiel fixe.

La dérivée de Jaumann s'écrit en référentiel fixe :

$$\overset{\nabla}{\sigma}^{J} = \dot{\sigma} - \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}$$
(2.18)

La dérivée de Green-Naghdi ou dérivée en rotation propre : elle a été développée après que des auteurs (Dienes, 1979), (Nagtegaal et De Jong, 1982) aient démontré que la dérivée de Jaumann conduisait à une réponse oscillatoire non physique dans le cas du cisaillement avec écrouissage cinématique et à de très grands taux de déformation. Dans son référentiel associé, dit en rotation propre, les axes principaux de la déformation pure (les vecteurs propres du tenseur **U**) apparaissent fixes. Ce référentiel est généré par le tenseur de rotation **R** issu de la décomposition polaire $\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}$. En écrivant $\mathbf{Q} = \mathbf{R}^T$ dans (2.12), on obtient l'expression de la dérivée de Green-Naghdi :

$$\overset{\nabla^{GN}}{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{\Omega} = \dot{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{R}^T \tag{2.19}$$

En suivant la nomenclature de (Martiny-Weitig, 1992) nous appelerons taux de rotation propre le tenseur Ω .

Aussi en partant de la décomposition polaire de \mathbf{F} , un calcul direct permet d'obtenir la relation suivante pour le spin \mathbf{W} :

$$\mathbf{W} = \mathbf{\Omega} + \mathbf{R} \cdot \operatorname{asym}(\dot{\mathbf{U}} \cdot \mathbf{U}^{-1}) \cdot \mathbf{R}^{T}, \qquad (2.20)$$

où $asym(\mathbf{A})$ représente la partie anti-symétrique d'un tenseur \mathbf{A} .

On remarque alors que pour un mouvement de corps rigide entre deux incréments consécutifs, le spin est égal au taux de rotation propre $\mathbf{W} = \mathbf{\Omega}$ et la dérivée de Green-Naghdi se ramène à celle de Jaumann.

La dérivée logarithmique, développée par (Xiao *et al.*, 1998) et supposée plus performante (précision, cohérences théoriques) que les deux précédentes. Le tenseur Ω y est remplacé par :

$$\mathbf{\Omega}' = \mathbf{W} + \sum_{i \neq j}^{m} \left(\frac{1 + \lambda_i / \lambda_k}{1 - \lambda_i / \lambda_j} + \frac{2}{\ln\left(\lambda_i / \lambda_j\right)} \right) \underline{b}_i \cdot \mathbf{D} \cdot \underline{b}_j,$$
(2.21)

où λ_i est une valeur propre du tenseur de Cauchy-Green gauche $\mathbf{B} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}^T$ et \underline{b}_i un vecteur propre de ce même tenseur.

2.1.3.3 La formulation en repère tournant

Elle consiste à formuler la loi de comportement directement dans le référentiel tournant sans retour vers le référentiel d'observation fixe (Hughes, 1984). Elle présente l'avantage d'offrir des expressions plus maniables car les dérivées objectives se réduisent, dans ces référentiels, à de simples dérivées temporelles sans termes additifs; en partant de (2.12), on obtient aisément :

$$\stackrel{\wedge}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{Q} \cdot \stackrel{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{Q}^T, \tag{2.22}$$

où $\stackrel{\sim}{\sigma}$ est l'expression de σ dans le référentiel tournant. Elle est adoptée dans de nombreux logiciels éléments finis concomitamment aux référentiels de Jaumann ou de Green-Naghdi.

2.2 Plasticité phénoménologique

Les modèles dit phénoménologiques se basent sur l'hypothèse d'homogénéité du milieu; en ce sens, le comportement moyen d'un matériau est supposé identique en tout point de son volume. Ce type de modélisation s'attache à retranscrire le comportement global observable à l'échelle macroscopique des matériaux. Ils se basent, de fait, sur des observations expérimentales du comportement mécanique des matériaux qui servent à définir les caractéristiques du comportement qui vont être modélisées. Nous présentons dans cette section une méthode générique de construction de ces modèles ; les résultats de caractérisation mécanique du chapitre 4 permettront ensuite de préciser les modèles adaptés à la description du comportement des matériaux étudiés.

Nous nous plaçons dans le cadre des transformations mécaniques isothermes dans un formalisme hypoélastique. On postule que le taux de déformation **D** se décompose comme suit :

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^p \tag{2.23}$$

où \mathbf{D}^e est le taux de déformation élastique et le taux de déformation plastique \mathbf{D}^p représente la partie irréversible donc permanente du taux de déformation. Cette décomposition additive de la déformation s'inspire de la théorie des petites déformations où une telle partition est justifiée par une analyse thermodynamique (voir (Lemaitre et Chaboche, 2004)). Notons qu'en grandes transformations, le formalisme hyperélastique s'appuie plutôt sur une décomposition multiplicative du gradient de la transformation

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \tag{2.24}$$

Un parallèle peut toute fois être établi entre les deux approches pour des matériaux présentant un faible taux de déformation élastique comme les métaux ($\mathbf{F}^e \approx \mathbf{I}$); en effet, le gradient de vitesses \mathbf{L} s'écrira :

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1}$$

$$= \dot{\mathbf{F}}^{e} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}} + \mathbf{F}^{e} \cdot \dot{\mathbf{F}}^{p} \cdot \mathbf{F}^{p^{-1}} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}}$$

$$= \mathbf{L}^{e} + \mathbf{F}^{e} \cdot \mathbf{L}^{p} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}}$$

$$\approx \mathbf{L}^{e} + \mathbf{L}^{p} \Rightarrow \mathbf{D} \approx \mathbf{D}^{e} + \mathbf{D}^{p},$$
(2.25)

où \mathbf{L}^{e} et \mathbf{L}^{p} sont respectivement les gradients de vitesses élastique et plastique.

2.2.1 Comportement élastique

Le comportement élastique du matériau est représenté par la loi de Hooke généralisée sous la forme incrémentale objective suivante :

$$\stackrel{\scriptscriptstyle \mathrm{V}}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : \mathbf{D},\tag{2.26}$$

où $\overline{\sigma}$ est un taux objectif de contrainte et **C** est le tenseur (de quatrième ordre) des constantes élastiques. Cette relation est valable dans la gamme des petites déformations jusqu'à un seuil de contraintes qui représente la limite d'élasticité (ou seuil de plasticité); au delà de cette limite, des déformations permanentes apparaissent dans le matériau et la décomposition du taux de déformation en parties élastique et plastique prend sens.

2.2.2 Comportement plastique

La description phénoménologique de la plasticité implique trois éléments constitutifs :

- un critère de plasticité qui permet de déterminer, au travers de la surface de charge, si l'état de contrainte dans le matériau induit une déformation permanente;
- une loi d'écoulement plastique pour quantifier les déformations plastiques;
- une loi d'écrouissage qui décrit l'évolution du comportement du matériau au cours de la déformation plastique.

2.2.2.1 Surface de charge

La définition de la plasticité repose sur le concept de surface de charge qui permet de distinguer les domaines de déformation élastique et plastique. La formalisation mathématique du concept conduit à l'écriture d'une fonction de charge f. La représentation de f dans l'espace des contraintes constitue la surface de charge, l'intérieur de cette surface représentant le domaine d'élasticité et son pourtour l'état (élasto)plastique. Elle doit être fermée et convexe.

De manière formelle, elle s'écrit :

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}_i, R_j) = \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}_i) - \sigma_y(\mathbf{X}_i, R_j), \qquad (2.27)$$

où $\bar{\sigma}$ est la contrainte équivalente et σ_y représente la contrainte seuil d'écoulement plastique en dessous de laquelle la déformation est élastique et le comportement réversible. La contrainte $\bar{\sigma}$ est le scalaire équivalent à l'état de contrainte multiaxial représenté par le tenseur σ . Les contraintes équivalente et seuil dépendent de variables internes tensorielles \mathbf{X}_i (i=1...M) et des variables internes scalaires et/ou paramètres matériau R_j (j= 1...N). Ces variables internes représentent des caractéristiques physiques du matériau tels que son type d'écrouissage.

Ainsi, le comportement sera dit élastique si :

$$f < 0$$
 ou $f = 0$ et $\frac{\partial f}{\partial \sigma} : \dot{\sigma} < 0$ (2.28)

Il est dit élastoplastique si :

$$f = 0$$
 et $\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} : \dot{\boldsymbol{\sigma}} \ge 0$ (2.29)

De manière synthétique, la surface de plasticité sera décrite par :

$$f(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}_i, R_j) = 0 \tag{2.30}$$

En plasticité non visqueuse, il faut également s'assurer que l'état de contrainte reste toujours sur la surface de plasticité ; on rajoute alors la condition de cohérence :

$$\dot{f}\left(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}_{i}, R_{j}\right) = 0 \tag{2.31}$$

L'expression de la contrainte équivalente dépend du critère considéré pour déterminer si le domaine plastique est atteint. La plupart des critères sont basés sur la contrainte de cisaillement maximale (Tresca) ou un seuil d'énergie (un terme quadratique) de distorsion élastique (von Mises). Dans la suite, nous employerons indistinctement les termes de critère et contrainte équivalente.

2.2.2.2 Expressions de contraintes équivalentes

Les critères de plasticité dits isotropes considèrent que la contrainte équivalente dans le matériau reste invariante quelque soit la direction de la sollicitation imposée sur ce dernier. Cette hypothèse se justifie dans le cas des matériaux isotropes auxquels ces critères isotropes (Tresca, von Mises...) peuvent être appliqués.

Certains matériaux présentent toutefois des orientations préférentielles marquées qui influent sur leur réponse aux sollicitations. Des critères dit anisotropes ont donc été développés pour intégrer l'influence sur l'écoulement plastique de l'orientation relative du chargement par rapport à un repère privilégié lié au matériau. Il en existe un très grand nombre ; une description approfondie de beaucoup d'entre eux est présentée dans (Banabic, 2010), les critères de (Hill, 1948), (Barlat *et al.*, 2003), (Banabic *et al.*, 2004) étant les plus répandus.

Critère quadratique de Hill 1948 (Hill, 1948)

Ce critère de plasticité, noté Hill48, s'utilise pour les matériaux (souvent les aciers) orthotropes (anisotropie qui comporte trois plans de symétrie et caractéristique de tôles laminées). La contrainte équivalente s'écrit :

$$\bar{\sigma}^2 = (\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{X}) : \mathbf{M} : (\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{X})$$
(2.32)

Le tenseur **M** ou tenseur de Hill, symétrique du quatrième ordre et diagonal dans le repère orthotrope matériau, introduit l'anisotropie du matériau par le biais de 6 coefficients F, G, H, L, M et N. Il admet les symétries majeures et mineures; de plus $M_{iikl} = 0$ ce qui traduit l'incompressibilité plastique et permet l'utilisation de σ au lieu de son déviateur **s**. Le tenseur de Hill s'écrit dans le repère matériau orthotrope :

$$\mathbf{M} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2G + 2H - F & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2F + 2H - G & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2H + 2G - H & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & N & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & L \end{bmatrix}$$
(2.33)

Pour un matériau isotrope, on a F = G = H = 1 et L = M = N = 3 de sorte à obtenir le tenseur de Hill égal au tenseur identité. Dans le cas des tôles, réaliser des essais mettant en jeu les composantes $\sigma_{3,j}$, j = 1, 2 est un problème épineux. On admettra dans ces travaux L = M = 3.

Pour obtenir le seuil d'écoulement initial égal à la limite d'élasticité en traction suivant la direction de laminage, on impose H + G = 2; ce qui laisse 3 paramètres indépendants F, G, N à identifier.

Critère de Bron & Besson (Bron et Besson, 2004)

Ce critère, noté BB2004, appartient à la classe des critères de plasticité basés sur l'utilisation des transformations linéaires pour modéliser l'anisotropie. Ils permettent d'obtenir des surfaces de plasticité intermédiaires entre celles de Tresca et de von Mises. Les premiers modèles de ce type furent développés par (Barlat *et al.*, 1991), (Karafillis et Boyce, 1993) et (Barlat *et al.*, 1997).

La contrainte équivalente s'écrit :

$$\bar{\sigma} = \left(\sum_{k=1}^{2} \alpha_k \left(\psi_k\right)^{\frac{a}{b_k}}\right)^{\frac{1}{a}}$$
(2.34)

C'est la somme de deux fonctions ψ positives, homogènes de degré 1 et pondérées par les deux paramètres, α_1 et α_2 , dont la somme vaut 1. Ces fonctions sont convexes par rapport à σ et ont les expressions suivantes :

$$\psi_1 = \frac{1}{2} \left(\left| S_2^1 - S_3^1 \right|^{b_1} + \left| S_3^1 - S_1^1 \right|^{b_1} + \left| S_1^1 - S_2^1 \right|^{b_1} \right), \tag{2.35}$$

$$\psi_2 = \frac{3^{b_2}}{2^{b_2} + 2} \left(\left| S_1^2 \right|^{b_2} + \left| S_2^2 \right|^{b_2} + \left| S_3^2 \right|^{b_2} \right),$$
(2.36)

où les S_k^i , i = 1, 2 et k = 1, 2, 3 sont les valeurs principales des tenseurs déviateurs modifiés \mathbf{s}_k obtenus du tenseur dit « offset » de contraintes $\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{X}} = \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{X}$ par la transformation linéaire suivante :

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{L}_k : \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{X}} \tag{2.37}$$

où \mathbf{L}_k portent les paramètres d'anisotropie et s'écrivent :

$$\mathbf{L}_{k} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} c_{2}^{k} + c_{3}^{k} & -c_{3}^{k} & -c_{2}^{k} & 0 & 0 & 0 \\ -c_{3}^{k} & c_{3}^{k} + c_{1}^{k} & -c_{1}^{k} & 0 & 0 & 0 \\ -c_{2}^{k} & -c_{1}^{k} & c_{1}^{k} + c_{2}^{k} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3c_{4}^{k} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3c_{5}^{k} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3c_{6}^{k} \end{bmatrix}$$
(2.38)

Cette façon élégante d'introduire l'anisotropie sur le tenseur σ permet de garder la fonction $\bar{\sigma}$ isotrope par rapport au tenseur **s** qui constitue un équivalent plastique isotrope. On a donc 12 paramètres c_i^k d'anisotropie, les paramètres a, b_1 et b_2 influençant la forme de la surface de plasticité. Comme pour le critère de Hill48, les paramètres c_i^k , i = 5, 6sont gardés égaux à 1 du fait de la difficulté de leur mise en évidence expérimentale; de plus en utilisant la relation $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$, on se retrouve avec un total de 12 paramètres indépendants à identifier.

Il faut souligner que pour $\alpha = 1$ et $c_i^1 = 1$, on retrouve le critère de von Mises pour $b_1 = 2$ ou 4 et celui de Tresca pour $b_1 = 1$ ou tendant vers $+\infty$.

2.2.2.3 Lois d'écrouissage

Toute transformation réelle provoque une dissipation d'énergie mécanique qui entraîne, entre autres, une modification de la structure interne du matériau et une évolution des propriétés mécaniques. Les lois et variables d'écrouissage permettent de rendre compte de cette évolution de la réponse du matériau. Celle-ci se traduit d'un point de vue conceptuel par une altération de la surface de charge qui représente le domaine d'élasticité. En fonction de l'évolution de la surface de charge, on distingue plusieurs types d'écrouissage.

Ecrouissage isotrope

Il décrit le durcissement qu'on observe lorsqu'on soumet un métal à un chargement qui le fait rentrer dans le domaine plastique. La réponse devient non linéaire et des essais de charge-décharge montrent l'augmentation de la contrainte seuil de plasticité ; la surface de charge connait une expansion supposée homothétique comme illustré sur la Figure 2.4.



FIGURE 2.4: Evolution de la surface de charge correspondant à un écrouissage isotrope dans le plan σ_1 - σ_2 . La surface en pointillés représente le domaine élastique initial.

La variable interne choisie pour la description de ce phénomène est la déformation plastique cumulée

$$p = \int_0^t \sqrt{\frac{2}{3}} \mathbf{D}^p : \mathbf{D}^p dt$$
(2.39)

Elle est associée à la variable scalaire R dont l'expression doit être adaptée au comportement du matériau.

De nombreuses expressions existent, dont celles de

– Hollomon

$$R = K_r (p)^{n_r}; (2.40)$$

- Swift

$$R = K_r \left(\epsilon_o + p\right)^{n_r}; \tag{2.41}$$

- Voce

$$R = \sigma_0 + \sigma_{sat} \left[1 - \exp\left(-C_R p \right) \right]; \tag{2.42}$$

- Hockett-Sherby

$$R = \sigma_{sat} - (\sigma_{sat} - \sigma_0) \exp\left(-C_R p^{n_r}\right)$$
(2.43)

où $C_R, \epsilon_o, K_r, n_r, \sigma_{sat}$ et σ_0 sont des paramètres à identifier.

Ecrouissage cinématique

L'écrouissage cinématique a été introduit pour modéliser les atypies de comportement que présentent certains matériaux à la suite d'une inversion du sens du chargement. L'effet Bauschinger, qui est la diminution du seuil de plasticité, ainsi que d'autres phénomènes reliés aux essais alternés et cycliques sont représentés à la Figure 2.5.

La modélisation mathématique se fait à l'aide d'une variable tensorielle \mathbf{X} (souvent dénommée back-stress ou contrainte de rappel) qui en se soustrayant à la contrainte permet d'effectuer une translation de la surface seuil dans l'espace des contraintes (voir Figure 2.6).

La variable interne associée à \mathbf{X} est la déformation plastique et diverses expressions ont été proposées pour modéliser l'évolution de \mathbf{X} , notamment celles de

- Prager

$$\dot{\mathbf{X}} = H_X \mathbf{D}^p; \tag{2.44}$$

- Ziegler

$$\dot{\mathbf{X}} = H_X \left(\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{X} \right) \dot{p}; \tag{2.45}$$



FIGURE 2.5: Illustration schématique des effets de l'écrouissage cinématique (Eggertsen et Mattiasson, 2011).



FIGURE 2.6: Evolution de la surface de charge correspondant à un écrouissage cinématique dans le plan σ_1 - σ_2 . La surface en pointillés représente le domaine élastique initial.

– Armstrong-Frederick

$$\dot{\mathbf{X}} = \frac{2}{3}C_X \mathbf{D}^p - D_X \mathbf{X} \dot{p}; \qquad (2.46)$$

où C_X, D_X et H_X sont des paramètres à identifier. Aussi, (Chaboche et Rousselier, 1983) ont montré qu'on pouvait grandement améliorer

la description de l'écrouissage en combinant plusieurs termes d'écrouissage cinématique.

Ecrouissage mixte et autres formes d'écrouissage

En associant des termes d'écrouissage isotrope et cinématique, on établit un cadre plus étendu de description dans lequel la surface de charge peut à la fois se translater et se dilater (voir Figure 2.7). On parle alors d'écrouissage mixte.



FIGURE 2.7: Evolution de la surface de charge correspondant à un écrouissage mixte dans le plan σ_1 - σ_2 . La surface en pointillés représente le domaine élastique initial.

Afin d'obtenir un cadre général pour décrire simultanément plusieurs phénomènes, de nombreux auteurs (Mróz, 1967), (Dafalias et Popov, 1976) ont proposé des modèles avec plusieurs surfaces de charge emboîtées les unes dans les autres. La spécification des « degrés de liberté » (translations et expansions individuelles et/ou groupées) des surfaces de charges confère une grande flexibilité à ces modèles. Le modèle développé par Yoshida et Uemori (Yoshida et Uemori, 2003) permet notamment de décrire à la fois l'effet Bauschinger, la saturation de l'écrouissage et l'adoucissement permanent au prix toutefois d'une complexité relativement importante.

Le modèle microstructural de (Teodosiu et Hu, 1998) permet, lui aussi, de reproduire ces différentes caractéristiques d'écrouissage en s'appuyant sur la description de l'évolution de structures de dislocations. L'usage de quatre variables internes d'écrouissage reliées à ces structures de dislocations permet à ce modèle de décrire non seulement l'effet Bauschinger mais également les phénomènes de transition observés après inversion du chargement. Aussi, (Barlat *et al.*, 2011) ont proposé de s'affranchir du concept d'écrouissage cinématique avec leur modèle homogène anisotrope. L'écrouissage y est isotrope et la contrainte équivalente se décompose en la somme d'un terme classique (isotrope ou anisotrope) et d'un terme fluctuant qui introduit une asymmétrie de la surface de charge. Cette composante fluctuante, qui distord la surface de charge, permet de modéliser un certain nombre de phénomènes dont l'effet Bauschinger ou une évolution anisotrope de la forme du domaine d'élasticité.

2.2.2.4 Loi d'écoulement plastique

Elle permet de déterminer la composante plastique de la vitesse de déformation. Cette dernière dérive d'un potentiel (visco)plastique, fonction de la contrainte, des variables internes et éventuellement de la température. Pour les matériaux métalliques, ce potentiel est généralement considéré identique à la fonction de charge : l'écoulement est dit associé ou normal. La vitesse de déformation plastique est alors déterminée par :

$$\mathbf{D}^{p} = \dot{\lambda} \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \tag{2.47}$$

Le scalaire $\dot{\lambda}$ est le multiplicateur plastique. Dans le cadre de la plasticité indépendante du temps, il est obtenu grace à la condition de cohérence (2.31).

En viscoplasticité, on suppose un potentiel viscoplastique Ω qui caractérise complètement l'écoulement en intensité et en direction. La condition de cohérence n'est pas nécessaire. Le potentiel de Norton généralisé est retenu dans nos travaux et l'écoulement plastique s'écrit :

$$\mathbf{D}^p = \frac{\partial\Omega}{\partial\boldsymbol{\sigma}},\tag{2.48}$$

avec

$$\Omega = \frac{K_v}{n_v + 1} \left(\frac{f^+(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{X}, R)}{K_v} \right)^{n_v + 1}, \qquad (2.49)$$

où K_v et n_v sont les paramètres de viscosité à identifier et f^+ est la partie positive de f.

2.3 Plasticité cristalline

A une échelle d'analyse plus fine, la physique des matériaux métalliques n'est pas conforme avec l'hypothèse d'homogénéité de la matière sur laquelle s'appuient les modèles de plasticité phénoménologique. Comme détaillé au chapitre 1, les métaux sont constitués de grains d'orientations et de tailles différentes et la déformation plastique provient du mouvement des défauts linéaires que sont les dislocations sur des plans cristallins à l'intérieur de ces grains. Ce type de matériau est donc caractérisé par une hétérogénéité microstructurale qui n'est pas prise en compte dans les modélisations phénoménologiques. Les effets de cette hétérogénéité se font d'autant plus ressentir pour des tôles ultrafines à faible nombre de grains dans l'épaisseur; le comportement individuel des grains influence alors considérablement la réponse globale et l'hypothèse de la séparation des échelles n'est plus valide.

La théorie de la plasticité cristalline s'appuie sur les mécanismes physiques responsables de la déformation et s'intéresse au comportement mécanique du monocristal soumis à une sollicitation. Elle offre ainsi un cadre de modélisation capable d'intégrer une certaine hétérogénéité du matériau. Dans les paragraphes suivants, les divers aspects qui contribuent à l'établissement d'un modèle de plasticité du monocristal et à son utilisation pour la prédicition du comportement de structures polycristallines sont détaillés.

2.3.1 Loi de comportement du monocristal

2.3.1.1 Cinématique du glissement cristallin

Le lien est établi ici entre la cinématique générale des grandes transformations et la théorie de la plasticité cristalline. Le formalisme adopté est issu des travaux de (Raphanel *et al.*, 2004), (Needleman *et al.*, 1985) et (Peirce *et al.*, 1982), dans la continuité de ceux de (Hill et Rice, 1972) et (Rice, 1971).

On considère le mouvement d'un cristal soumis à une transformation. Comme expliqué au préalable, la déformation plastique intervient dans un cristal par le glissement de plans cristallographiques spécifiques sous l'action d'une sollicitation. Le cristal est mu d'une configuration de référence Ω_0 à une configuration courante Ω_t en passant, si plasticité il y a, par une configuration intermédiaire Ω_{it} .

On considère que seul le glissement plastique intervient dans cette dernière configuration ; les déformations élastiques n'ont d'effet que sur le réseau cristallin et se produisent après le glissement plastique pour convecter le cristal en configuration courante Ω_t . La configuration intermédiaire Ω_{it} est donc généralement appelée configuration relâchée en ce qu'on la retrouve en relâchant l'intégralité des contraintes présentes dans la position courante.



FIGURE 2.8: Décomposition de la déformation en partie élastique et plastique lors du mouvement du cristal.

Chaque système de glissement (s) est caractérisé par deux vecteurs orthogonaux : le vecteur normal au plan de glissement $\underline{m}_{0}^{(s)}$ et le vecteur de la direction de glissement $\underline{m}_{0}^{(s)}$. L'indice « 0 » indique des quantités exprimées dans la configuration de référence. Dans la décomposition multiplicative du gradient de la transformation (2.24), proposée par (Lee, 1969), \mathbf{F}^{e} représente la distorsion et la rotation élastique du réseau cristallin tandis que \mathbf{F}^{p} correspond à la déformation plastique de la matière par cisaillement. Le réseau cristallin n'est pas affecté par le cisaillement ; ce dernier est induit par glissement de plans cristallographiques et provoque également une rotation de corps rigide de la matière par rapport au réseau (Nemat-Nasser, 2004).

De nombreux auteurs (Teodosiu, 1996) admettent la décomposition suivante :

$$\mathbf{F}^e = (\mathbf{I} + \mathbf{e}) \cdot \mathbf{R},\tag{2.50}$$

avec **e** un tenseur symétrique de petites déformations élastiques ($|\mathbf{e}| \ll 1$).

Cette décomposition illustre le fait que la partie élastique de la transformation relève essentiellement d'une rotation.

(Nemat-Nasser, 2004) propose les décompositions

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{V}^e \cdot \mathbf{R}^* \quad \text{et} \quad \mathbf{F}^p = \mathbf{R}^{**} \cdot \mathbf{U}^p, \tag{2.51}$$

qui établissent la distinction entre la rotation élastique du réseau cristallin \mathbf{R}^* et la rotation plastique \mathbf{R}^{**} de la matière, \mathbf{V}^e et \mathbf{U}^p étant respectivement les tenseurs d'élongation élastique et plastique. Ce formalisme sera exploité dans l'implémentation numérique au chapitre 3.

Le gradient de vitesses se décompose en

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^p, \tag{2.52}$$

où $\mathbf{L}^{e} = \dot{\mathbf{F}}^{e} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}}$ est le gradient de vitesses élastique et $\mathbf{L}^{p} = \mathbf{F}^{e} \cdot \mathbf{L}_{i}^{p} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}}$ celui de vitesses plastique avec $\mathbf{L}_{i}^{p} = \dot{\mathbf{F}}^{p} \cdot \mathbf{F}^{p^{-1}}$ le gradient de vitesses plastique en configuration relâchée.

On relie alors cette dernière quantité au glissement cristallographique en écrivant d'après (Rice, 1971) :

$$\mathbf{L}_{i}^{p} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{(s)} \mathbf{S}_{0}^{(s)}, \qquad (2.53)$$

où $\dot{\gamma}^{(s)}$ est le taux de glissement et $\mathbf{S}_0^{(s)} = \underline{m}_0^{(s)} \otimes \underline{n}_0^{(s)}$ est le tenseur de Schmid en configurations initiale et relâchée.

De cette relation, on obtient en configuration courante l'expression du gradient de vitesses plastique :

$$\mathbf{L}^{p} = \mathbf{F}^{e} \cdot \mathbf{L}_{i}^{p} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{(s)} \mathbf{S}^{(s)}, \qquad (2.54)$$

où $\mathbf{S}^{(s)} = \underline{m}^{(s)} \otimes \underline{n}^{(s)}$ est le tenseur de Schmid en position courante.

En exploitant ces dernières relations et la décomposition en parties symétrique et antisymétrique $\mathbf{L} = \mathbf{D} + \mathbf{W}$, on obtient les taux de déformation et le spin plastiques comme suit :

$$\mathbf{D}^{p} = \frac{1}{2} (\mathbf{L}^{p} + \mathbf{L}^{p^{T}}) \Rightarrow \mathbf{D}^{p} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{(s)} \mathbf{D}^{(s)}$$
$$\mathbf{W}^{p} = \frac{1}{2} (\mathbf{L}^{p} - \mathbf{L}^{p^{T}}) \Rightarrow \mathbf{W}^{p} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{(s)} \mathbf{W}^{(s)}$$
$$\text{avec} \quad \mathbf{D}^{(s)} = \frac{1}{2} (\mathbf{S}^{(s)} + \mathbf{S}^{(s)^{T}}) \text{ et } \mathbf{W}^{(s)} = \frac{1}{2} (\mathbf{S}^{(s)} - \mathbf{S}^{(s)^{T}})$$

Les vecteurs caractéristiques des plans cristallographiques sont affectés uniquement par la composante élastique de la transformation et transportés vers Ω_t suivant :

$$\underline{m}^{(s)} = \mathbf{F}^{e} \cdot \underline{m}_{0}^{(s)} \quad \text{et} \quad \underline{n}^{(s)} = \underline{n}_{0}^{(s)} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}}, \tag{2.56}$$

où $\underline{m}^{(s)}$ et $\underline{n}^{(s)}$ sont les vecteurs en configuration courante. Il faut à présent spécifier les conditions sous lesquelles intervient le glissement cristallin.

2.3.1.2 Comportement local

Cission résolue

Au niveau local, le glissement d'un système est fonction de la cission résolue $\tau^{(s)}$ et de sa cission critique d'activation $\tau_c^{(s)}$. La cission résolue est la sollicitation appliquée localement, à partir de l'état de contrainte global σ , à chaque système de glissement. Elle s'obtient par extension tridimensionnelle de la loi de Schmid suivant :

$$\tau^{(s)} = \underline{m}^{(s)} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}^{(s)} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}^{(s)}$$
(2.57)

Loi d'écoulement

Pour la détermination du taux de glissement, deux approches de modélisation existent : celles de la plasticité non visqueuse et de la viscoplasticité.

En plasticité non visqueuse, la sensibilité du matériau à la vitesse de déformation est considérée négligeable et le glissement est conditionné par :

$$\tau^{(s)} < \tau_c^{(s)} \Rightarrow \dot{\gamma}^{(s)} = 0$$

$$\tau^{(s)} = \tau_c^{(s)} \text{ et } \dot{\tau}^{(s)} < \dot{\tau}_c^{(s)} \Rightarrow \dot{\gamma}^{(s)} = 0$$

$$\tau^{(s)} = \tau_c^{(s)} \text{ et } \dot{\tau}^{(s)} = \dot{\tau}_c^{(s)} \Rightarrow \dot{\gamma}^{(s)} \neq 0$$

$$(2.58)$$

Cette loi est semblable aux conditions de cohérence et de Kuhn-Tucker que l'on retrouve dans les modèles macroscopiques. Il est toutefois possible que s'activent plus de systèmes qu'il n'est nécessaire pour accomoder la déformation du cristal. Il faut alors lever l'indétermination et procéder à une sélection des systèmes réellement actifs. Une des approches les plus répandues est de définir les systèmes réellement actifs comme ceux qui minimisent l'énergie de déformation (Franciosi, 1984), (Franciosi et Zaoui, 1991). D'un point de vue numérique, il faut procéder à une analyse combinatoire des systèmes pour chaque incrémént de chargement ce qui est très coûteux en temps de calcul et peut dans certains cas, (Van Houtte, 1988), (Delannay, 2001), ne pas résoudre l'indétermination. Des solutions ont été proposées à ces problèmes; (Delannay, 2001) entre autres propose une procédure numériquement plus performante et (Lorrain, 2005), (Franz, 2008), (Abed-Meraim, 2009) proposent une fonction de régularisation inspirée de la viscoplasticité qui reste toutefois indépendante du temps physique.

En viscoplasticité, le taux de glissement d'un système est directement calculé à partir d'une relation liant la cission critique à la cission résolue. La question de choix de systèmes actifs ne se pose pas car tous les systèmes sont actifs mais seulement certains auront un taux de glissement significatif.

De nombreux auteurs, (Teodosiu *et al.*, 1975), (Hutchinson, 1976), (Peirce *et al.*, 1982), (Needleman *et al.*, 1985), (Tabourot, 1992), (Berbenni *et al.*, 2004), utilisent une loi issue de la théorie de l'activation thermique des dislocations :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \dot{\gamma}_o^{(s)} \text{signe}\left(\tau^{(s)}\right) \left|\frac{\tau^{(s)}}{\tau_c^{(s)}}\right|^n, \qquad (2.59)$$

où $\dot{\gamma}_o$ est un taux de glissement de référence et n le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation.

D'autres auteurs, (Cuitino et Ortiz, 1993), (Kuchnicki *et al.*, 2006), (Bonnet, 2007), proposent des variantes de cette loi qui introduisent un seuil et atténuent sa forte non linéarité :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \dot{\gamma}_o^{(s)} \text{signe}\left(\tau^{(s)}\right) \left(\left| \frac{\tau^{(s)}}{\tau_c^{(s)}} \right|^n - 1 \right)$$
(2.60)

(Cailletaud, 1992) s'inspire quand à lui des modèles phénoménologiques macroscopiques et introduit des variables locales d'écrouissage isotrope et cinématique :

$$\dot{\gamma}^{(s)} = \left\langle \frac{\left| \tau^{(s)} - x^{(s)} \right| - r^{(s)}}{k} \right\rangle^n \text{signe} \left(\tau^{(s)} - x^{(s)} \right), \tag{2.61}$$

où $x^{(s)}$ est la variable d'écrouissage cinématique et $r^{(s)}$ la variable d'écrouissage isotrope. (Saai, 2007) et (Manole, 2010) utilisent également ce type de lois en reliant les variables d'écrouissage à des densités de dislocations.

Lois d'écrouissage

La déformation plastique entraîne l'évolution des propriétés du matériau. En plasticité cristalline, cette évolution est reliée à la cission critique d'activation. De nombreux modèles ont été proposés pour rendre compte de cet effet.

(Mandel, 1965) et (Peirce et al., 1982) proposent la loi d'évolution suivante :

$$\dot{\tau_c}^{(s)} = \sum_{\beta} h_{s\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \qquad (2.62)$$

où les $h_{s\beta}$ sont les coefficients de la matrice d'écrouissage identifiés par Chang et Asaro (Chang et Asaro, 1981) tels que :

$$h_{s\beta} = \begin{cases} h(\gamma) & \text{si } \alpha = \beta \text{ (\'ecrouissage propre)} \\ qh(\gamma) & \text{si } \alpha \neq \beta \text{ (\'ecrouissage latent)} \end{cases}$$
(2.63)

où q est le ratio d'écrouissage latent et

$$h(\gamma) = \operatorname{sech}^{2}\left(\frac{h_{0}\gamma}{\tau^{*} - \tau_{0}}\right), \qquad (2.64)$$

avec :

 h_0 : la constante de proportionnalité d'écrouissage

 τ^* : la contrainte de cisaillement en saturation

 τ_0 : la contrainte de cisaillement de référence

 γ est le glissement total sur tous les systèmes tel que :

$$\gamma = \int \sum_{s} \dot{\gamma}^{(s)} dt \tag{2.65}$$

Ce modèle sera dénommé, dans la suite, PAN pour Peirce, Asaro, Needleman (Peirce *et al.*, 1982).

En outre (Franciosi, 1984), (Tabourot, 1992), (Delaire *et al.*, 2000), (Tabourot, 2001) ont proposé des modèles basés sur des analyses microstructurales des dislocations. La variable primaire est la densité de dislocation $\rho^{(s)}$ sur le système de glissement (s). La cission critique est reliée à la densité de dislocations par

$$\tau_c^{(s)} = \mu b \sqrt{\sum_u \alpha^{su} \rho^u} \tag{2.66}$$

où μ est le module de cisaillement, b le vecteur de Burgers et α^{su} est le coefficient évaluant la force de l'interaction entre les dislocations des systèmes de glissement (s) et (u).

A partir des expressions de production et d'annihilation des dislocations, on obtient la loi d'évolution des densités de dislocations :

$$\dot{\rho}^{(s)} = \frac{1}{b} \left(\frac{\sqrt{\sum_u \beta^{su} \rho^u}}{K} - 2y_c \rho^{(s)} \right) \dot{\gamma}^{(s)}, \qquad (2.67)$$

où K est lié au libre parcours moyen d'une dislocation, y_c est la distance critique entre deux dislocations susceptibles de s'annihiler et β^{su} est également relié à l'interaction entre dislocations mais contrôle spécifiquement l'accumulation des dislocation en forêts sur le système (s) en fonction de celles sur le système (u). C'est un modèle à base physique qui offre un point de vue compréhensif sur les mécanismes sous-jacents de la déformation plastique.

Aussi, les travaux menés par (Manole, 2010) montrent que la variable densité de dislocations ne rend pas compte de l'hétérogénéité physique que peut receler une microstructure de dislocations. Il propose d'affiner la description en discrétisant les densités de dislocations en classes suivant leur cission critique d'activation. Ce modèle propose également une description, par des variables à base de densités de dislocations, des effets de l'écrouissage cinématique.

Ces différents modèles font intervenir des densités de dislocations dites statistiquement stockées ou distribuées. Leur mouvement sur les systèmes de glissement, à l'intérieur des grains, propage la déformation plastique et le phénomène d'écrouissage résulte de leurs interactions. Cependant, la continuité de la déformation d'un grain à l'autre nécessite la présence de dislocations aux joints de grains. Ces dernières permettent d'assurer la compatibilité géométrique du polycristal et sont couramment désignées par l'anglicisme GND pour « Geometrically Necessary Dislocations » (voir (Nye, 1953), (Ashby, 1970)). Les GND sont liées au gradient spatial de la déformation et, prises en compte dans un modèle de plasticité cristalline, permettent de reproduire les effets de taille dits de second ordre (« strain gradient effects », voir entre autres (Fleck *et al.*, 1994), (Gurtin, 2002), (Evers *et al.*, 2004), (Nicaise *et al.*, 2011), (Schwartz, 2011)).

Au rang de ces approches non locales, figurent également les modèles basés sur les milieux continus généralisés de Cosserat. Les micro-rotations, caractéristiques de cette description, permettent d'établir le lien entre la courbure plastique du réseau cristallin et les GND (voir par exemple (Forest *et al.*, 2000)).

Dans nos travaux, la description des effets de taille statistiques (ou du premier ordre) sera privilégiée. En effet, ils semblent prédominants pour des épaisseurs de tôle de l'ordre de la centaine de micromètres (Keller *et al.*, 2012). Ces effets de taille résultent essentiellement de la diminution du nombre de grains dans l'épaisseur et de la distribution d'orientations; le modèle PAN et le modèle Tabourot (Tabourot, 2001) à base de densités de dislocations statistiquement stockées seront donc employés.

2.3.1.3 Loi de comportement

Il s'agit désormais d'établir la loi régissant le comportement mécanique du cristal entier. La loi de comportement élastique s'écrit en formalisme hypoélastique avec le tenseur taux de déformation élastique et sa mesure de taux de contrainte conjuguée comme suit :

$$\overset{\nabla^*}{\tau} = \mathbf{C} : \mathbf{D}^e, \tag{2.68}$$

où **C** est le tenseur des constantes élastiques, $\stackrel{\nabla}{\tau^*}$ est le taux de contraintes objectif de Kirchhoff, corotationnel avec la distortion élastique du réseau. La relation précédente s'écrira donc :

$$\nabla^{\tau}_{\tau} = \dot{\tau} - \mathbf{W}^{e} \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W}^{e} = \mathbf{C} : \mathbf{D}^{e} = \mathbf{C} : \mathbf{D}^{e}$$
(2.69)

Si on considère la décomposition $\mathbf{W}^e = \mathbf{W} - \mathbf{W}^p$ et qu'on substitue cette relation dans (2.69), on obtient :

$$\nabla^*_{\boldsymbol{\tau}} = \dot{\boldsymbol{\tau}} - \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W} + \mathbf{W}^p \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W}^p = \mathbf{C} : \mathbf{D}^e$$
(2.70)

En combinant cette relation avec la définition de la dérivée de Jaumann de au, on obtient :

$$\mathbf{C}: \mathbf{D}^e = \stackrel{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \mathbf{W}^p \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W}^p$$
(2.71)

En introduisant la décomposition $\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^p$ dans (2.70), on arrive à :

$$\stackrel{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \mathbf{C} : \mathbf{D} - \mathbf{C} : \mathbf{D}^p + \mathbf{W}^p \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W}^p$$
(2.72)

Les taux de déformation et de rotation plastique sont liés au glissement cristallographique et calculés comme suit :

$$\mathbf{D}^{p} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{(s)} \mathbf{D}^{(s)} \quad et \quad \mathbf{W}^{p} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{(s)} \mathbf{W}^{(s)} \tag{2.73}$$

On peut alors combiner (2.72) et (2.73) pour écrire :

$$\stackrel{\nabla}{\tau} = \mathbf{C} : \mathbf{D} - \sum_{s} \dot{\gamma}^{(s)} (\mathbf{C} : \mathbf{D}^{s} + \mathbf{W}^{s} \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W}^{s})$$
(2.74)

Pour obtenir la loi de comportement exprimée en fonction de σ tenseur de Cauchy, écrivons la relation entre τ et σ :

$$\dot{\boldsymbol{\tau}} = \dot{J}\boldsymbol{\sigma} + J\dot{\boldsymbol{\sigma}} = J(\operatorname{tr}(\mathbf{D})\boldsymbol{\sigma} + \dot{\boldsymbol{\sigma}})$$
 (2.75)

En considérant une configuration de Lagrange réactualisée ($\mathbf{F}=\mathbf{I}$ et donc J=1) et la décomposition $\mathbf{D}^e = \mathbf{D} - \mathbf{D}^p$, on obtient :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} - \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W} + \operatorname{tr}(\mathbf{D})\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \mathbf{D} - \mathbf{C} : \mathbf{D}^p - \mathbf{W}^p \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}^p$$
 (2.76)

En identifiant la dérivée de Jaumann de σ dans l'expression précédente, on obtient la loi de comportement :

$$\stackrel{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : \mathbf{D} - (\mathbf{C} : \mathbf{D}^p + \mathbf{W}^p \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}^p) - \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr}(\mathbf{D})$$
(2.77)

En terme de dérivée temporelle, on obtient :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C} : \mathbf{D} + \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W} - \boldsymbol{\sigma} \operatorname{tr}(\mathbf{D}) - (\mathbf{C} : \mathbf{D}^p + \mathbf{W}^p \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W}^p)$$
(2.78)

De plus, la déformation entraı̂ne une évolution de l'orientation cristalline qui est responsable du développement de texture. Dans le formalisme ci, l'évolution de la matrice d'orientation du cristal \mathbf{Q} est traduite par la relation :

$$\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{W}^e \cdot \mathbf{Q} = (\mathbf{W} - \mathbf{W}^p) \cdot \mathbf{Q}$$
(2.79)

2.3.2 Le polycristal

Le comportement du monocristal étant maintenant établi, il faut effectuer la transition d'échelles permettant de passer du monocristal à une structure macroscopique.

Les pièces et structures sont composées de milliers de grains. Deux classes de méthodes existent pour établir un pont entre la loi monocristalline et le calcul de structures à l'échelle macroscopique : les méthodes d'homogénéisation à champs moyens et à champs complets.

2.3.2.1 Méthodes à champs moyens

Ces méthodes requièrent des hypothèses simplificatrices afin d'obtenir des solutions analytiques. Soit une structure constituée d'un matériau (alliage métallique). On commence par déterminer un Volume Elementaire Représentatif ou VER du matériau. Un VER est le plus petit volume de matière contenant assez de constituants élémentaires (ici les grains) pour répresenter statistiquement le matériau, et une fois homogénéisé en un Milieu Homogène Equivalent (MHE), reproduire son comportement macroscopique. La taille d'un VER est donc étroitement liée au problème considéré; le rapport entre la plus petite dimension du VER et la plus grande dimension de son constituant de base constitue toutefois une mesure pertinente. Nous reviendrons plus en détail sur la notion de VER au chapitre 4. Une fois le VER choisi, tous les grains de même orientation sont réunis en une phase *i* à laquelle on associe une fraction volumique f_i . Le théorème de Hill-Mandel impose que les tenseurs de déformation **E** et de contrainte macroscopique Σ s'écrivent comme la moyenne des tenseurs correspondants locaux ϵ^i et σ^i :

$$\mathbf{E} = \sum_{i} f_{i} \boldsymbol{\epsilon}^{i} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\Sigma} = \sum_{i} f_{i} \boldsymbol{\sigma}^{i} \tag{2.80}$$

Si on applique à la structure un tenseur macroscopique de déformation \mathbf{E} et qu'on cherche à calculer le tenseur macroscopique de contrainte résultant Σ , la démarche de résolution du problème implique les étapes suivantes :

- la localisation de la déformation macroscopique **E** dans chaque phase en une déformation $\epsilon^i = \mathbf{A}^i : \mathbf{E}$ où \mathbf{A}^i est le tenseur de localisation de la déformation;
- la description locale du comportement par une loi de comportement locale (de monocristal) $\sigma^i = \mathbf{c}^i : \epsilon^i$
- l'opération de moyenne par laquelle on remonte à la réponse effective du VER $\Sigma = \langle \mathbf{c}^i : \mathbf{A}^i \rangle : \mathbf{E}$

où l'opérateur <> représente l'opération de moyenne sur le volume considéré.

Les premiers modèles ainsi développés étaient basés sur des hypothèses fortes. (Taylor, 1938) et (Bishop et Hill, 1951) ont négligé l'élasticité et supposé la déformation plastique locale uniforme et égale à la déformation macroscopique; par la suite (Lin, 1957) a étendu ces modèles en incluant la déformation élastique. Bien que capables de décrire certains comportements des matériaux (Guilhem, 2011), ces modèles fournissent des modules effectifs trop élevés et surestiment les contraintes. Dans la même logique simplificatrice (champ de contraintes uniforme), les modèles de (Sachs, 1928) et (Batdorf et Budiansky, 1949) sous estiment les modules effectifs. De nombreux autres modèles ont été proposés pour assouplir les restrictions sur les hypothèses de déformation des polycristaux; les modèles issus des travaux de (Van Houtte *et al.*, 2005) introduisent des relaxations en considérant des configurations de grains particulières avec des degrés de libertés spécifiques.

En se basant sur la solution d'Eshelby (Eshelby, 1957) au problème d'une inclusion uniformément plastifiée plongée dans une matrice infinie élastique, (Kröner, 1961) proposa le modèle dit autocohérent. Il considère chaque phase comme une inclusion plongée dans une matrice élastoplastique dont les propriétés sont celles du MHE. L'accomodation des déformations entre chaque phase et la matrice est toutefois élastique ce qui rend le modèle trop raide (modules effectifs surévalués). (Hill, 1965) a apporté une solution à ce problème en considérant une formulation incrémentale. Son modèle reste l'une des approches d'homogénéisation par champs moyens les plus employées. Le modèle VPSC (Molinari *et al.*, 1987), (Lebensohn et Tomé, 1993) applique également la solution d'Eshelby aux matériaux métalliques en substituant aux phases les grains. Enfin, (Pilvin et Cailletaud, 1991) proposent le modèle en β , dérivé des modèles de (Hill, 1965) et (Berveiller et Zaoui, 1978) et inspiré d'une approche phénoménologique. Ils introduisent une variable tensorielle d'accomodation censée limiter les contraintes intergranulaires qui se développent au cours de la déformation. C'est un modèle flexible, capable de reproduire des réponses macroscopiques sous divers chargements et qui est largement mis en oeuvre (Gérard, 2008), (Guilhem, 2011).

2.3.2.2 Méthodes à champs complets

En dépit des améliorations proposées au fil des années, les méthodes à champs moyens restent limitées par :

- les (fortes) hypothèses sur la forme des grains;
- l'hypothèse d'homogénéité des champs mécaniques au sein des phases;
- la non représentation spatiale des grains (effets de voisinage non reproduits);
- la simplicité des conditions aux limites imposables.

Peirce (Peirce *et al.*, 1982) fut l'un des premiers à coupler la théorie de la plasticité cristalline à la méthode des éléments finis laissant entrevoir d'intéressantes possibilités. En effet, la méthode des éléments finis assure l'équilibre des forces et la compatibilité des déplacements entre les éléments finis et permet d'analyser des problèmes sous des conditions aux limites complexes et diverses; elle présente également l'avantage de fournir une représentation spatiale des problèmes et possède un coté démonstratif et visuel qui en fait un outil plébiscité en ingénierie des structures. L'augmentation de la puissance des ordinateurs permet depuis une vingtaine d'année la modélisation et l'analyse des structures à l'échelle du grain, pavant la voie à la Crystal Plasticity Finite Element Method (CPFEM). Dans cette approche dite d'homogénéisation par éléments finis, la structure formée de grains est maillée par des éléments finis aux points d'intégration desquels on implante une loi monocristalline comme illustré sur la Figure 2.9.



FIGURE 2.9: Homogénéisation par éléments finis.

La compatibilité des déformations entre les grains est assurée par la méthode des éléments finis. Aucune hypothèse n'est nécessaire sur la forme des grains ou les champs mécaniques locaux et l'hétérogénéité inter et intragranulaire peut être décrite. De fait, la CPFEM présente un large panel d'applications possibles (Roters *et al.*, 2010) et s'impose de plus en plus comme une approche de modélisation viable du comportement de matériaux polycristallins. Cependant, elle nécessite une représentation numérique de la microstructure qui peut conduire à des simplifications peu réalistes comme par exemple sur la description des joints de grains. De plus, pour des structures et pièces importantes les temps de calcul restent souvent trop importants pour une utilisation industrielle efficace et l'on est souvent obligé de travailler sur des agrégats de grains qui constituent des VER ; une alternative consiste à implémenter des méthodes à champs moyens à un niveau intermédiaire (au point d'intégration par exemple).

Néanmoins, au regard des caractéristiques des pièces étudiées dans ces travaux (peu de grains dans des épaisseurs inférieures à 150 microns), le coût en temps de calcul reste raisonnable. Nous avons ainsi la possibilité d'effectuer un calcul de structures à une telle échelle sans hypothèses restrictives.

Enfin, des méthodes spectrales basées sur les transformées de Fourier rapides ont été mises en oeuvre pour résoudre le système différentiel exprimant la compatibilité et l'équilibre. Ces méthodes couplées à la plasticité cristalline, (A. Lebensohn, 2001), ont engendré une nouvelle classe de modèles dits CPFFT pour Crystal Plasticity Fast Fourier Transforms. Comparativement à la CPFEM, la méthode CPFFT jouit d'une efficacité numérique supérieure mais ne peut être appliquée qu'à des microstructures périodiques.

2.4 Conclusion

Deux approches de modélisation du comportement mécanique de matériaux polycristallins ont été présentées dans ce chapitre. L'approche macroscopique est basée sur la théorie de la plasticité dite phénoménologique; elle permet de reproduire des réponses matériaux par le biais de variables internes et de paramètres ajustables dont le sens physique peut ne pas toujours être clairement établi. Néanmoins, elle fournit un cadre de description aux concepts plus accessibles que celui de la plasticité cristalline. Cette dernière part d'une échelle d'analyse plus fine, celle du monocristal, dont elle décrit le comportement, pour remonter à l'échelle de la structure. Elle nécessite un schéma de transition d'échelles, ici une méthode à champs complets qui implique une modélisation géométrique de la microstructure. Ces différents aspects laissent présager une mise en oeuvre plus complexe que pour l'approche phénoménologique. Cependant, les mécanismes physiques à l'origine de l'écoulement plastique et la représentation de la microstructure sont la promesse d'une modélisation fine et plus conforme au comportement réel de la structure. Ceci n'en est que plus vrai pour les tôles ultrafines dans lesquelles le faible nombre de grains met en exergue l'hétérogénéité microstructurale des matériaux métalliques. Pour de telles applications, l'emploi d'une modélisation phénoménologique basée sur l'hypothèse d'homogénéité de la matière devient questionnable.

Dans ces travaux, afin de disposer d'un cadre de description relativement complet, le choix a été fait de s'appuyer sur les deux types de modélisation. Cela nous laisse la possibilité de passer de l'une à l'autre lorsque le besoin s'en fera ressentir, et de pouvoir les comparer lorsque les conditions sont réunies. Les outils numériques permettant d'utiliser ces approches de modélisation dans des calculs de structure sont présentés au chapitre suivant.