

## Modélisation micromécanique de l'effet de taille de grains sur le comportement mécanique de matériaux biphasés viscoplastiques

J.-M. Pipard<sup>a</sup>, N. Nicaise<sup>a</sup>, O. Bouaziz<sup>b</sup>, S. Berbenni<sup>a</sup>, M. Berveiller<sup>a</sup>  
<sup>a</sup>Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux, UMR CNRS 7554,  
ENSAM, 57078 Metz, France.  
<sup>b</sup>Arcelor Research, 57283 Maizières-les-Metz, France.

Email : Jean-Marc.PIPARD@metz.ensam.fr

### Résumé :

*Les méthodes d'homogénéisation basées sur le problème de l'inclusion d'Eshelby (1957), tiennent compte du comportement local, de la fraction volumique et de la morphologie des différents constituants du matériau mais souffrent d'une absence de description de longueurs internes (taille de grain par exemple). Cet article propose une nouvelle approche micromécanique basée sur une représentation du grain par une inclusion constituée d'une zone intérieure sphérique plastiquement uniforme entourée d'une couche extérieure sphérique, épousant le joint de grain, d'épaisseur donnée et de fraction volumique dépendant par construction de la taille de grain. L'ensemble est noyé dans un milieu homogène dont les propriétés dépendent des équations constitutives de l'intérieur et de la couche de l'inclusion et de leurs fractions volumiques respectives. La couche dans laquelle évolue à la fois des dislocations géométriquement nécessaires et des dislocations stockées, représente la zone affectée par le gradient de déformation plastique entre l'inclusion et le milieu homogène.*

### Abstract :

*Homogenization methods based on the Eshelby inclusion problem well capture the effects of local behaviour, volume fractions and morphologies of constituents on the macroscopic behavior but still suffer from a lack of representation of internal lengths in the material associated with non-local effects. In this contribution, we propose a new micromechanical approach based on the representation of the material as a two-phase composite: the inclusion phase which corresponds to the grain core region for which statistically stored dislocations mainly participate in the plastic flow of the material, and, the matrix phase which is a region close to grain boundaries where additional plastic strain gradients and associated geometrically necessary dislocations are present. The macroscopic material behavior is retrieved applying simple self-consistent schemes for viscoplastic materials using viscoplastic power law compliances for each phase. Qualitative results in terms of macroscopic behaviors, local mechanical fields and evolution of dislocation densities are discussed.*

### Mots-clefs :

**Micromécanique ; Effet de taille ; GNDs ;**

### 1 Introduction

La prédiction du comportement mécanique des matériaux hétérogènes à partir de leur microstructure constitue aujourd'hui un enjeu industriel important pour développer, maîtriser et optimiser les nouveaux matériaux. Ces matériaux sont plastiquement hétérogènes : du fait de leur microstructure, les différentes entités microstructurales (phases, grains) ne se déforment pas de la même manière ce qui crée des gradients de déformations. Afin d'accommoder ces gradients et de rendre compatible les déformations entre par exemple une zone « dure » et une zone « molle », des dislocations, appelées dislocations géométriquement nécessaires (GNDs pour « geometrically necessary dislocations »), ont été introduites par Nye (1953), Cottrell (1964) et Ashby (1970). Le concept des

GNDs permet, en décrivant le gradient plastique tout en introduisant un paramètre de longueur interne microstructural, de prendre en compte l'effet de taille. Cette théorie n'a pas pour l'instant été couplée avec les modèles micromécaniques à champs moyens qui offrent pourtant une souplesse de temps de calcul par rapport aux méthodes numériques type éléments finis.

Cet article propose, par des modèles simples autocohérent de transition d'échelle, de mettre en évidence l'effet de taille de grain par une description de l'évolution des GNDs et des SSDs à l'intérieur du joint de grain.

## 2 Modèle micromécanique

### 2.1 Représentation physique du grain

En s'inspirant de la description géométrique initialement proposée par Bouaziz (2006), la structure du grain (considérée comme sphérique) peut être décomposée en deux régions (Fig. 1). La première région qui représente le noyau du grain est constituée d'une zone viscoplastique dont l'écroutissage est décrit par l'évolution de la densité de dislocations statistiques (SSD) nommée  $\rho_s$ . La seconde région d'épaisseur  $\lambda$  qui entoure le noyau représente le joint de grain. Dans cette région, la densité locale de dislocations se compose de SSDs et de GNDs, ces dernières participant de manière prépondérante à l'écroutissage.

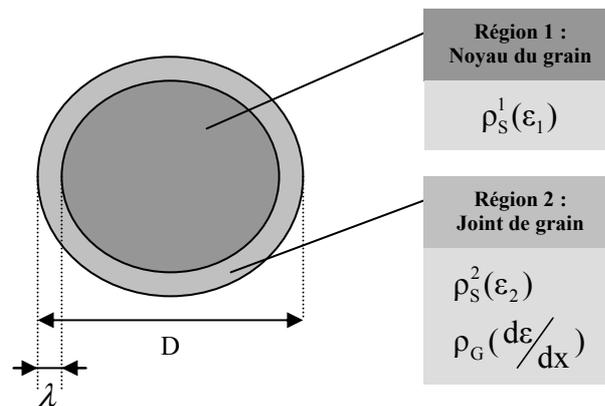


FIG. 1- Grain sphérique de diamètre D décomposé en 2 régions.

Le modèle considère le stockage des dislocations géométriquement nécessaires comme proportionnel au gradient local de déformation. En se reportant aux travaux de Arsenlis *et al.* (1999), la relation décrivant l'évolution de la densité des GNDs (écrit  $\rho_g$ ) à l'intérieur du joint de grain est :

$$\dot{\rho}_G = \frac{\bar{r}}{b} \frac{\partial \dot{\gamma}^p}{\partial x} \quad (1)$$

où  $b$  est la norme du vecteur de burgers,  $\dot{\gamma}^p$  le taux de cisaillement plastique et  $\bar{r}$  le facteur de Nye reflétant la mesure scalaire de la densité de GNDs résultant des gradients de déformation plastique macroscopique (Abu Al-Rub *et al.* (2006)).

La déformation plastique de chacune des régions est reportée sur la Fig. 2.

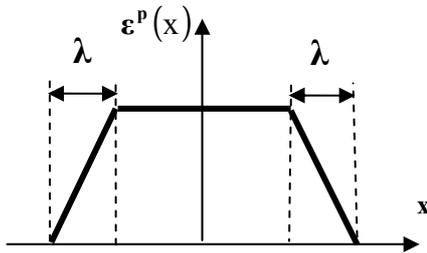


FIG. 2 Déformation plastique à l'intérieur des deux régions.

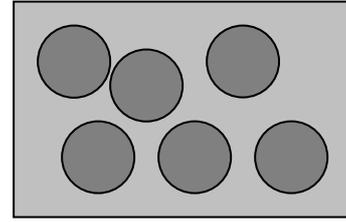


FIG. 3 - Modélisation du matériau par un agrégat biphase.

Le paramètre de longueur interne  $\lambda$ , qui représente l'épaisseur du joint de grain, est dans cette première approche considéré comme indépendant de la déformation et de la taille de grain. Cette simplification est discutée dans la section 4.

Dans cette première approche, le modèle micromécanique utilisé considère le matériau hétérogène comme un agrégat biphase sphérique (Fig. 3) ce qui veut dire que la région 1 et la région 2 peuvent être inversés sur la Fig. 3. Des travaux sur un modèle à trois phases devront être menés ultérieurement afin de décrire plus précisément la topologie et les interactions entre l'intérieur du grain (sphère) et le joint de grain (coque sphérique).

## 2.2 Lois d'évolution des phases

Etant donné l'utilisation de modèles micromécaniques simples et de la non-linéarité du problème, le comportement de l'ensemble du grain (noyau + joint de grain) est considéré comme viscoplastique non linéaire. Le grain étant supposé conserver sa forme sphérique durant la déformation, l'hypothèse des petites déformations est donc suffisante.

On considère un agrégat biphase constitué de deux phases viscoplastiques. Chaque phase (i) avec  $i=1,2$  est incompressible et suit une loi viscoplastique 1D non-linéaire. Le comportement de l'inclusion et de la matrice suivent une loi puissance de même sensibilité à la vitesse  $m$  :

$$\sigma_{eq}^{(i)} = k_i \dot{\varepsilon}_{eq}^{p(i)} \quad (2)$$

La vitesse de déformation de chaque phase est obtenue à partir de lois de mélange utilisant la mécanique de l'inclusion d'Eshelby (1957). Dans le cas de matériaux viscoplastiques linéaires ( $m=1$ ), et en considérant le domaine des phases comme sphérique, on retrouve le résultat de Berveiller *et al.* (1979) :

$$\dot{\varepsilon}_1 = \frac{5x}{2+3x} \dot{\varepsilon} \quad \text{et} \quad \dot{\varepsilon}_2 = \frac{5x}{2C+3x} \dot{\varepsilon} \quad (3)$$

En substituant (3) dans les lois de mélanges, on obtient une équation du second degré en  $x$  qui possède une racine positive unique :

$$x = \frac{1}{6} \left[ 3 - 2C - 5f(1-C) + \sqrt{[3 - 2C + 5f(1-C)]^2 + 24C} \right] \quad (4)$$

où  $x=K_{\text{mélange}}/K_1$  et  $C=k_2/k_1$  est le rapport des consistances des deux phases

De nombreux travaux concernent le mélange de deux phases viscoplastiques non linéaires ( $m \neq 1$ ) de même sensibilité  $m$ . Parmi eux, Briottet *et al.* (1997), ont déterminé par une méthode variationnelle les lois de vitesses de déformation pour différents cas et ont proposé, dans un souci de facilité d'utilisation, une équation analytique approchée de leurs résultats, ici pour le cas d'inclusions sphériques :

$$\dot{\epsilon}_{\text{eq}}^{p(1)} = \frac{1}{1 + \alpha(C_i - 1) + \beta(C_i^{1/\sqrt{m}} - 1) + \gamma(C_i^{1/m} - 1)} \dot{\epsilon} \quad (5)$$

où  $C_i = k_i/k_{\text{mélange}}$  et  $\alpha$ ,  $\beta$ , et  $\gamma$  des polynômes de  $m$ .

L'écrouissage des deux phases se traduit par une dépendance des consistances  $k_1$  et  $k_2$  vis-à-vis des densités de dislocations :

$$k_i = \alpha M \mu b \sqrt{\rho_G^{(i)} + \rho_S^{(i)}} \quad (6)$$

L'évolution des densités de dislocations statiquement stockées est donnée par (Kocks *et al.* (2003)) :

$$\dot{\rho}_S^{(i)} = M \left( k \sqrt{\rho_S^{(i)} + \rho_G^{(i)}} - f \rho_S^{(i)} \right) \dot{\epsilon}_{\text{eq}}^{p(i)} \quad (7)$$

où  $k$  et  $f$  sont des paramètres matériaux donnés dans le TAB. 1.

Dans la phase 1 (intérieur du grain) :  $\rho_G^{(1)} = 0$  et  $\dot{\rho}_G^{(1)} = 0$ . Dans la phase 2 (entourage du joint de grain), en utilisant l'Eq. (1), il vient :

$$\dot{\rho}_G^{(2)} = M \frac{\bar{r}}{b} \frac{\partial \dot{\epsilon}_{\text{eq}}^{p(2)}}{\partial x} \quad (8)$$

Enfin, en considérant l'hypothèse d'un gradient linéaire dans le joint de grain d'épaisseur  $\lambda$  (Bouaziz (2006)) :

$$\dot{\rho}_G^{(2)} = M \frac{\bar{r}}{b} \frac{\dot{\epsilon}_{\text{eq}}^{p(1)} - \dot{\epsilon}_{\text{eq}}^{p(2)}}{\lambda} \quad (9)$$

### 3 Résultats et discussions

L'épaisseur du joint de grain a été fixée à  $\lambda = 0,1 \mu\text{m}$  ce qui semble réaliste compte tenu de la plage de diamètres de grain pris en compte (de 1 à 100 microns). Les paramètres matériaux utilisés sont donnés dans le TAB. 1. Les deux modèles micromécaniques utilisés (Berveiller *et al.* (1979) et Briottet *et al.* (1997)), donnent qualitativement les mêmes résultats. Le coefficient de sensibilité des phases est égal à  $m=0,1$ .

$\sigma_0$ (Mpa)	$\bar{r}$	M	$\alpha$	f	k	b (m <sup>-1</sup> )	$\mu$ (Mpa)	$\nu$
80	2	3	0.4	5	$0.03b^{-1}$	$2.5 \cdot 10^{-10}$	80000	0.3

TAB. 1 – Paramètres matériaux utilisés.

La FIG. 4 met en évidence l'effet de taille de grain sur la contrainte macroscopique du matériau. On peut noter que l'effet de taille est particulièrement important pour les plus petites tailles ( $D < 10\mu\text{m}$ ) et qu'au-delà d'un certain diamètre ( $D > 10\mu\text{m}$ ), l'effet est négligeable : les courbes pour  $D=50\mu\text{m}$  et  $D=100\mu\text{m}$  sont quasiment confondues.

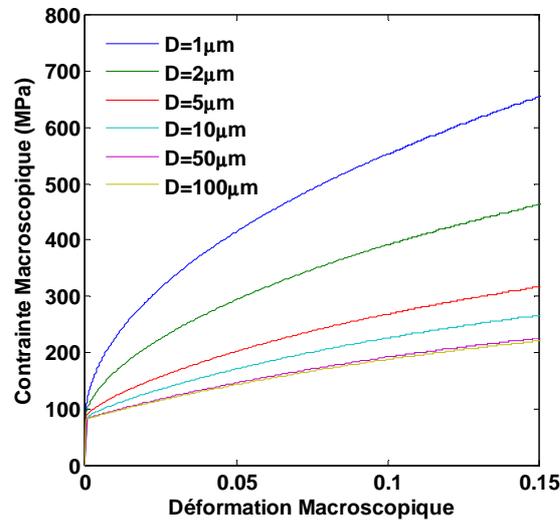


FIG. 4 – Contraintes macroscopiques pour différentes taille de grains :  $D=1\mu\text{m}$  (bleu) ;  $D=2\mu\text{m}$  (vert) ;  $D=5\mu\text{m}$  (rouge) ;  $D=10\mu\text{m}$  (bleu ciel) ;  $D=50\mu\text{m}$  (violet) ;  $D=100\mu\text{m}$  (marron) ;

L'évolution des contraintes entre les phases est également étudiée afin de mieux comprendre les mécanismes physiques responsables de l'effet de taille sur l'écroutissage. Comme il apparaît sur la FIG. 5, les contraintes locales dans le joint de grain sont très grandes comparées à celles régnant dans l'intérieur du grain. Pour une taille de grain  $D=100\mu\text{m}$ , le comportement global de la déformation plastique est gouverné par la déformation à l'intérieur du grain.

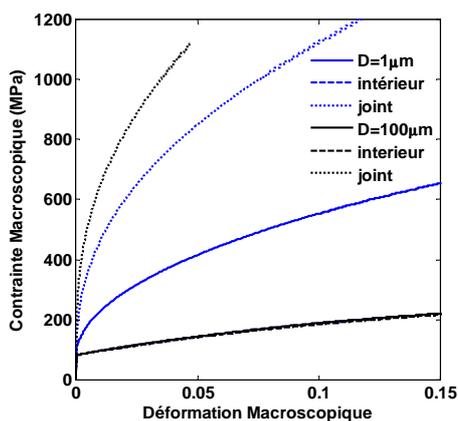


FIG. 5 – Contraintes locales des phases pour deux tailles de grain différentes.

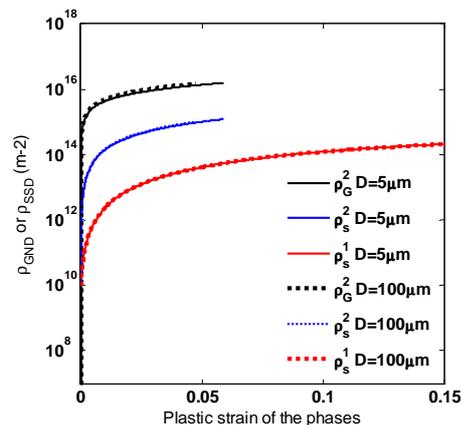


FIG. 6 – Evolutions des densités de dislocations (SSDs et GNDs) à l'intérieur des deux phases.

Les évolutions des dislocations géométriquement nécessaires et statistiquement stockées sont reportées sur la FIG. 6. La densité des GNDs est très grande comparée à celle des SSDs et ce, quelque soit la taille de grain. Il apparaît également que la densité des SSDs dans le joint de grain est plus grande que celle à l'intérieur du grain, ce qui est cohérent avec les observations au MET.

## 4 Conclusions et perspectives

Une première approche micromécanique simple permettant de mettre en évidence l'effet de taille de grain a été développée. Celle-ci repose sur une description simplifiée du gradient de déformation plastique à l'intérieur du joint de grain, utilisant un paramètre de longueur interne associé à la présence de dislocations géométriquement nécessaires. Les résultats montrent de façon qualitative que l'effet de taille est bien pris en compte malgré les transitions d'échelles utilisées qui ne permettent de décrire la non linéarité du problème que de façon limitée. En effet, la linéarisation du problème diverge pour des sensibilités  $m$  inférieures à 0,1 (Briottet *et al.* (1997)), ce qui limite par exemple la confrontation du modèle aux résultats expérimentaux (loi viscoplastique fortement non linéaire dans le cas des aciers). Néanmoins, les résultats montrent qualitativement qu'il est possible de décrire l'effet de taille par une approche micromécanique à champs moyens. Des travaux récents (Berbenni *et al.*, (2007)) utilisant une approche autocohérente en élasto-viscoplasticité (Berbenni *et al.*, (2004, 2007) ainsi que le même type de représentation décrivent l'effet de taille de grains sur l'écroutissage des aciers IF.

Enfin, des efforts (théoriques ou expérimentaux) doivent être fournis concernant la description du paramètre  $\lambda$ , considéré ici en première approximation comme indépendant de la déformation et de la taille de grain. Des travaux récents mettent déjà en évidence quelques-unes de ces dépendances (Abu Al-Rub *et al.* (2006)).

## Références

- Abu Al-Rub, R.K., Voyiadjis, G.Z. 2006 A physically based gradient plasticity theory. *Int. J. Plasticity*. **22**, 654-684.
- Arsenlis, A., Parks, D.M. 1999 Crystallographic aspects of geometrically-necessary and statistically stored dislocation density. *Acta Mater.* **47**, 1597-1611.
- Ashby, M.F. 1970 The deformation of plastically non-homogeneous materials. *Phil. Mag.* **21**, 399-424.
- Berbenni, S., Bouaziz, O., Pipard, J.-M., Nicaise, N., Berveiller, M. 2007 A micromechanics-based elastic-viscoplastic model with non local effects due to geometrically necessary dislocations. *ATEMA' 2007. International Conference on Advances and Trends in Engineering Materials. and their Applications. Montreal, Canada 6-10 Août 2007*
- Berbenni, S., Favier, V., Lemoine, X., Berveiller, M. 2004. Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of steels having different microstructures. *Mater. Sci. Engng. A* **372**, 128-136.
- Berbenni, S., Favier, V., Berveiller, M. 2007. Impact of the grain size distribution on the yield stress of heterogeneous materials. *Int. J. Plasticity* **23**(1), 114-142.
- Berveiller, M., Zaoui, A. 1979 An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*. **26**, 325-344.
- Bouaziz, O. 2006 Modélisations des matériaux hétérogènes appliquées aux aciers multiphasés. *Colloque National AUSSOIS 2006, 23-27 Janvier 2006*.
- Briottet, L., Gilormini, P., Montheillet, F. 1997 Approximate analytical equations for the deformation of an inclusion in a viscoplastic matrix. *Acta Mechanica* **134**, 217-234.
- Cottrell, A.H. 1964 The Mechanical properties of Matter. *Willey, New York*, p. 277.
- Eshelby, J. D., The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proc. R. Soc. London Ser. A* **241**, 376-396.
- Kocks UF, Mecking H. 2003 Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case *Prog. Mater. Sci.* **48**:171
- Nye, J.F., 1953 Some geometrical relations in dislocated crystal. *Acta Metall.* **1**, 153-162.
- Mecking, H., Kocks, U.F., Hartig, Ch. (1996) Taylor factors in materials with many deformation modes. *Scripta Mater.* **35**, 465-471.
- Sevillano, G., Aldazabal, J. 2004 Ductilization of nanocrystalline materials for structural applications. *Scripta Mater.* **51**, 795-800.