

# Modélisation du comportement cyclique des polycristaux métalliques

F. RACHDI, M. SAUZAY

CEA, DEN-DMN-SRMA, bât.455, 91191 Gif-sur-Yvette, France

## Résumé

*Le modèle d'homogénéisation à champ moyen de Hill-Hutchinson est utilisé afin de prédire les courbes d'écrouissage cyclique des polycristaux à partir des lois cristallines. La taille de grain affectant peu le comportement cyclique des polycristaux cubiques à faces centrées comme le nickel ou le cuivre, les paramètres de ces lois sont identifiés grâce aux courbes expérimentales de monocristaux. Différents métaux et alliages à structure cubique à face centrée sont étudiés. Les courbes macroscopiques prédites sont comparées aux résultats de calculs par éléments finis cristallins et aux courbes expérimentales.*

## Abstract

*The aim of this study is to propose an elastoplastic model of the cyclic behavior of polycrystals based on the self-consistent Hill-Hutchinson model. The grain size has a weak effect on the cyclic strain stress curves (CSSCs) of face-centred cubic polycrystals provided slip is not planar. That is why the crystalline plasticity laws parameters have been identified from the single crystal CSSCs provided by the literature. The predicted macroscopic curves are then compared with the ones computed by the finite element method and experimental data for several face-centered cubic metals and alloys.*

**Mots clés:** comportement cyclique ; homogénéisation ; plasticité cristalline ; polycristaux métalliques CFC.

## 1 Introduction

Les modèles d'homogénéisation à champs moyens ont largement été utilisés afin de prédire le comportement des polycristaux à partir des lois cristallines. Ces approches ont tout d'abord été restreintes aux modèles de Sachs [1] et de Taylor [2] grâce à leur simplicité. Le modèle d'homogénéisation de Sachs sous-estime en général la contrainte macroscopique et se base sur une hypothèse de glissement simple et uniforme dans le polycristal. Quant au modèle de Taylor, il surestime la contrainte macroscopique et suppose que la déformation plastique est homogène dans tous les grains, ce qui exige en général l'activation de cinq systèmes de glissement par grain. Les prédictions obtenues par ces deux modèles ne peuvent être utilisées qu'à titre qualitatif et ne sont satisfaisantes que pour un domaine restreint de déformation plastique. De plus, pour l'aluminium et le nickel, les deux approches mènent à une estimation erronée des amplitudes de contraintes quelle que soit la valeur de la déformation appliquée [3]. La même conclusion a été obtenue concernant l'application des modèles de Sachs et de Taylor à l'acier austénitique inoxydable 316L [4].

Une nouvelle voie a été ouverte par Kröner [5] avec la formulation d'un modèle auto-cohérent. Cette approche se base sur la solution proposée par Eshelby [6] pour le problème d'inclusion ellipsoïdale dans une matrice élastique infinie. Chaque grain est alors considéré comme une inclusion dans une matrice formée par les autres grains du polycristal, le comportement de cette matrice étant le comportement réel recherché (d'où l'auto-cohérence). Selon le schéma simplifié de Kröner, la loi de localisation est basée sur une interaction élastique entre le grain et la matrice, et conduit à une surestimation du comportement macroscopique [7].

Afin de prendre en compte les interactions élastoplastiques entre le grain et la matrice, une formulation auto-cohérente, basée sur l'utilisation des incréments des modules macroscopiques, a été proposée par

Hill [8] et implémentée par Hutchinson [9]. Berveiller et Zaoui [7] ont également proposé un modèle, utilisant un module sécant et appliqué seulement dans le cas de chargement monotone. Barbe et al. [10] ont montré qu'en chargement monotone, les calculs par éléments finis cristallins sur de grands agrégats donnaient des résultats proches du modèle de Berveiller-Zaoui. Dans le cadre viscoplastique, Lebensohn et al. [11] ont aussi comparé le modèle incrémental et le modèle de Taylor avec des calculs numériques par Transformée de Fourier, toujours en chargement monotone.

Dans cette étude, le modèle de Hill-Hutchinson a été utilisé afin de simuler les courbes d'écrouissage cyclique des polycristaux de structure cubique à faces centrées. Les courbes prédites sont ensuite comparées à celles obtenues par les calculs Eléments Finis. Les paramètres des lois cristallines sont identifiés grâce aux courbes expérimentales de monocristaux issues de la littérature, pour les différents matériaux.

## 2 Comportement du monocristal

Le comportement élastique des grains est défini grâce à l'élasticité isotrope (le module de Young  $E$  et le coefficient de poisson  $\nu$ ). S'agissant de polycristaux de structure cubique à faces centrées, le comportement élastique cristallin est défini grâce à trois paramètres homogènes à des contraintes  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ . Dans notre cas aucune anisotropie cristalline n'est prise en compte.

Les cristaux considérés dans cette étude possèdent une structure Cubique à Face Centrée (CFC). Chaque grain possède alors 12 systèmes de glissement facile ( $\{111\} \langle 110 \rangle$ ). Les lois de plasticité cristalline ont été définies pour chaque système de glissement par les lois d'évolution des variables d'écrouissage et par un critère de glissement. Les travaux de Li et Laird [12] ont montré que l'écrouissage cyclique des cristaux est dû majoritairement à l'augmentation de la contrainte cinématique et que la contrainte isotrope change peu avec l'amplitude de la déformation plastique. Ainsi une loi d'écrouissage cinématique non linéaire, de type Armstrong-Fredericks, a été utilisée. Pour chaque système de glissement  $i$  ( $i=1, 12$ ), l'écrouissage cinématique est régi par :

$$dx_i = C d\gamma_i^p - \alpha x_i |d\gamma_i^p \text{ cumulé}|$$

$x_i$  étant la contrainte de cisaillement cinématique,  $\gamma_i^p$  le glissement plastique sur le système  $i$ . pour chaque matériau les paramètres  $C$  et  $\alpha$  doivent alors être identifiés. L'activation du glissement sur un système  $i$  a lieu une fois que le critère suivant est satisfait :

$$|\tau_i - x_i| = \tau_i^c$$

$\tau_i$  étant la contrainte de cisaillement et  $\tau_i^c$  la contrainte isotrope critique qui permet de prendre en compte le durcissement dû aux interactions entre les différents systèmes de glissement.

$$\tau_i = \sigma : \frac{1}{2} (\underline{n}_i \times \underline{m}_i + \underline{m}_i \times \underline{n}_i)$$

$$\tau_i^c = \tau_0 + h_0 \sum_{j=1}^{12} a_{ij} |\gamma_j^p| \quad \text{avec} \quad \begin{cases} a_{ij} = q & \text{si } i \neq j \\ a_{ii} = 1 \end{cases}$$

$\sigma$  est le tenseur de contrainte appliqué au grain  $g$ ,  $\underline{n}_i$  et  $\underline{m}_i$  sont respectivement la normale au plan de glissement et la direction de glissement sur le grain  $g$ ,  $\tau_0$  est la limite élastique initiale du système de glissement  $i$ ,  $h_0$  est le coefficient d'écrouissage isotrope et les coefficients  $a_{ij}$  sont ceux de la matrice d'écrouissage.

L'influence de la taille des grains étant faible sur le comportement cyclique des polycristaux métalliques, elle ne sera pas prise en compte dans nos calculs. En effet, les travaux de Mughrabi et Wang [13] menés sur des polycristaux de cuivre, pour différentes tailles de grains (25 - 400 $\mu$ m), montrent que la taille de grain influence peu la réponse macroscopique du polycristal. Les conclusions des travaux de Buque et al. [14], menés sur des polycristaux de Ni, mettent aussi en évidence un faible effet de la taille des grains sur les microstructures développées au cours de la déformation cyclique (bandes de glissements persistantes, labyrinthes, murs...) ce qui explique le faible effet sur la réponse macroscopique.

### 3 Identification des paramètres

Les paramètres  $\tau_0$ ,  $c$  et  $\alpha$  ont été identifiés à partir des courbes d'érouissage cyclique de monocristaux issues de la littérature. Seuls les grains bien orientés ont été considérés et deux cas ont été étudiés.

Les paramètres de la loi d'érouissage cinématique non linéaire  $C$  et  $\alpha$  ont été identifiés à l'aide des courbes d'érouissage cyclique expérimentales obtenues sur des monocristaux bien orientés, ayant un facteur de Schmid proche de 0,5. Ce sont les grains bien orientés qui s'activent en premier lors du chargement cyclique vu leur facteur de Schmid élevé, contrairement aux grains orientés pour le glissement multiple qui ne s'activent qu'à des valeurs de déformations plastiques plus élevées.

L'introduction de la variable d'érouissage isotrope permet d'imposer le glissement simple aux grains considérés. L'expérience permet de choisir un coefficient d'auto-érouissage faible ( $h_0$  est de l'ordre de 1MPa) et un érouissage latent très élevé ( $q$  est de l'ordre de  $10^5$ ), le durcissement induit par le glissement dans le système primaire sur le système de glissement secondaire est tellement élevé que seul un système de glissement est effectivement activé. On note que le fait de multiplier les coefficients  $h_0$  et  $q$  par 10 ne change pas les résultats obtenus.

La figure 1 présente les courbes d'érouissage cyclique obtenues à partir de la loi d'érouissage cinématique non linéaire sur des monocristaux <-149> du nickel et de l'acier austénitique inoxydable 316L dans le cas du glissement simple imposé. L'identification des paramètres s'est effectuée grâce aux résultats expérimentaux obtenus par Gorlier [4] pour l'acier 316L et par Bretschneider [15] pour Ni.

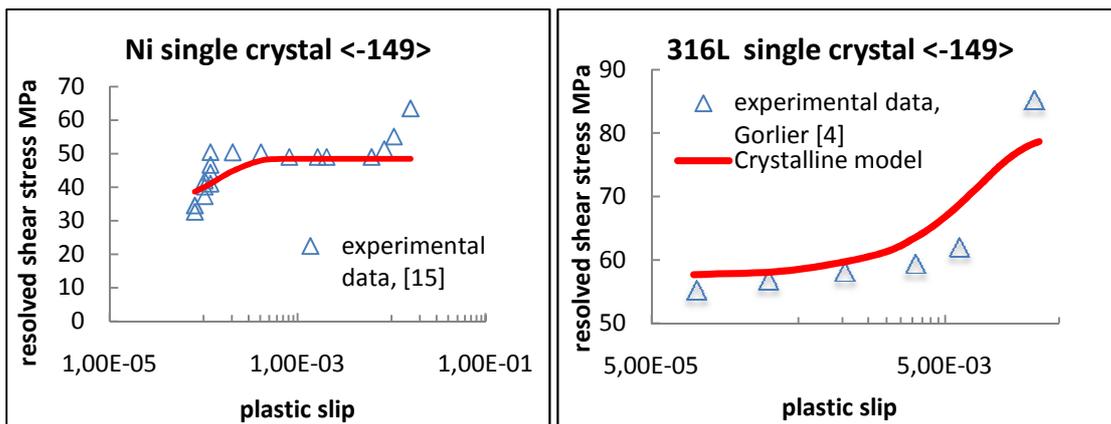


Fig. 1- courbes d'identification et données expérimentales des monocristaux de Ni et de l'acier 316L orientés dans la direction <-149>

### 4 Loi de localisation et homogénéisation

Les simulations ont été effectuées sur un agrégat de 40 grains. Des calculs effectués sur un agrégat de 80 grains ont permis d'obtenir les mêmes résultats avec un écart de l'ordre de 3%. Dans le cas où le glissement simple est imposé, des calculs avec 40, 80 et 150 grains permettent d'avoir des résultats très proches avec un écart inférieur à 3%. Chaque grain représente une phase cristallographique caractérisée par son orientation et sa fraction volumique.

Le passage de l'échelle du grain à l'échelle macroscopique se fait à l'aide d'une loi de transition appelée loi de localisation. Elle permet de relier les champs de contrainte et de déformation locaux aux champs macroscopiques. La loi d'interaction de Hill-Hutchinson utilisée dans notre étude est rappelée dans [7] :

$$\sigma = \Sigma + \alpha^{HH}(E^p - \varepsilon^p)$$

avec  $\alpha^{HH} = [2\mu\mu'(7-5\nu')]/[\mu'(7-5\nu')+2\mu(4-5\nu')]$

$$\mu' = \mu/(1+2\mu f) \text{ et } \nu' = [v+2\mu/3(1+v)f]/[1+4\mu/3(1+v)f]$$

$\sigma$  et  $\varepsilon^p$  sont les champs de contrainte et de déformation plastiques locaux,  $\Sigma$  et  $E^p$  sont les champs de contrainte et de déformation plastique macroscopiques,  $\mu$  est le module de cisaillement élastique et  $\nu$  le coefficient de poisson.

Dans le cas d'un chargement uniaxial selon l'axe 1, le calcul du coefficient  $f$  peut être simplifié par la relation :

$$f = \frac{3}{2} \frac{dE_{11}^p}{d\Sigma_{11}}$$

Le modèle d'interaction de Hill-Hutchinson ainsi que celui de Kröner ont été implémentés dans le code SIDOLO [16], élaboré par Pilvin et Cailletaud.

Pour vérifier l'implémentation numérique de notre modèle, des premières simulations ont été effectuées en plasticité parfaite pour le modèle de Kröner et avec un écrouissage isotrope linéaire  $H=0.04\mu$  pour le modèle de Hill-Hutchinson. Dans les deux cas, aucun écrouissage cinématique n'a été pris en compte. Comparées aux courbes de référence données dans Berveiller et Zaoui [7], les courbes prédites sont très proches comme l'indique les figure 2 (a) et (b).

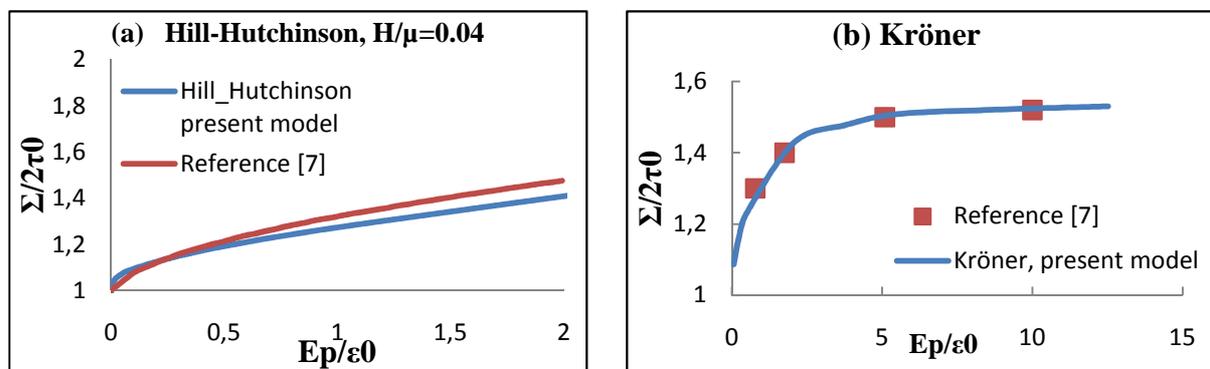


Fig. 2 - comparaison entre les résultats obtenus par le modèle et les courbes de références :  
(a) Ecrouissage linéaire isotrope, (b) plasticité parfaite,  $\varepsilon_0=2\tau_0/E$ ,  $E$  le module de Young

## 5 Simulation du comportement du polycristal

### 5.1 L'effet du glissement secondaire

Après validation de l'implémentation du modèle, des simulations ont été effectuées sur plusieurs matériaux de structure cubique à faces centrées afin de prédire leur comportement macroscopique cyclique. Les courbes d'écrouissage cyclique obtenues sont comparées à celles prédites par les calculs éléments finis, considérées comme référence. Les courbes prédites par calculs aux éléments finis ont été obtenues par Sauzay et al. [17].

Les figures 3a et 3b présentent les courbes d'écrouissage cyclique obtenues pour un acier austénitique inoxydable 316L et pour l'aluminium, dans le cas du glissement secondaire. Dans ce cas, seul l'écrouissage cinématique non linéaire a été pris en compte dans les lois de plasticité cristalline. Le modèle de Hill-Hutchinson permet d'obtenir des résultats très proches de ceux simulés par les calculs éléments finis, avec un écart de l'ordre de 8% pour l'acier 316L et de 5% pour l'aluminium. La méthode des éléments finis représente l'avantage de n'imposer aucune loi d'interaction entre les grains et le polycristal, ce qui justifie le fait de la considérer comme référence, le modèle auto-cohérent de Hill-Hutchinson permet donc de reproduire quasiment les mêmes résultats avec des temps de calculs nettement plus courts.

Pourtant, comparés aux résultats expérimentaux, les prédictions obtenues par les deux modèles sous-estiment largement le comportement réel du polycristal et ceci quelle que soit la valeur de la déformation appliquée.

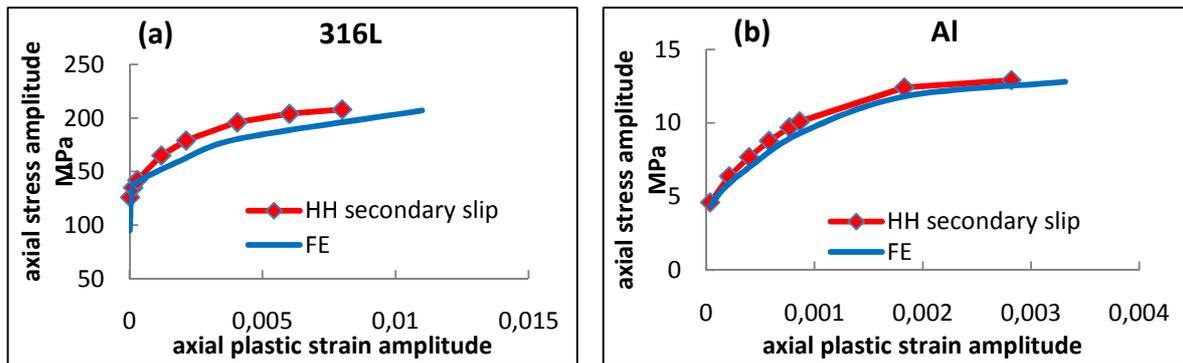


Fig.3 - comparaison des courbes macroscopiques prédites par le modèle de Hill-Hutchinson et par calcul éléments finis pour l'acier 316L (a) et pour l'aluminium (b)

## 5.2 L'effet du glissement simple

Dans cette partie, l'attention a été portée sur l'influence du glissement simple imposé ( $q=10^5$ ) sur la prédiction du comportement macroscopique des polycristaux de structure cubique à faces centrées. En effet, il a été noté dans de nombreux travaux que pour des amplitudes de déformations plastiques inférieures à  $10^{-3}$ , seul un système de glissement est activé dans la plupart des grains [17]. De plus, l'apparition des bandes de glissement persistantes, une microstructure commune aux polycristaux en chargement cyclique, se fait préférentiellement dans des grains orientés pour le glissement simple.

Les figures 4a et 4b présentent les courbes d'érouissage macroscopiques prédites par le modèle de Hill-Hutchinson et par les calculs aux éléments finis pour l'acier 316L et pour l'aluminium, les données expérimentales sont également présentées.

Nous notons que le fait d'imposer le glissement simple ( $h_0=1\text{MPa}$  et  $q=10^5$ ) permet d'atteindre des niveaux de contraintes plus élevés que dans le cas de glissement secondaire ( $q=1,4$ ). Pour les deux matériaux (Al et l'acier 316L), les courbes macroscopiques prédites par le modèle de Hill-Hutchinson appliqué au glissement simple sont identiques à celles calculées par éléments finis pour des amplitudes de déformation plastique inférieures ou égales à  $10^{-3}$  environ. L'écart entre les courbes prédites par les deux modèles augmente avec l'amplitude de la déformation plastique.

Comparés aux courbes expérimentales, les deux types de prédictions permettent d'obtenir des résultats relativement proches du comportement réel pour de faibles amplitudes de déformation plastique (jusqu'à  $10^{-3}$ ). Pour des amplitudes plus élevées, le modèle de Hill-Hutchinson sous-estime le comportement du polycristal contrairement à l'approche par éléments finis qui surestime les niveaux de la contrainte macroscopique. Des calculs sont actuellement en cours pour des amplitudes de déformations plus élevées afin de comparer plus en détails les prédictions du modèle de Hill-Hutchinson et du calcul par éléments finis.

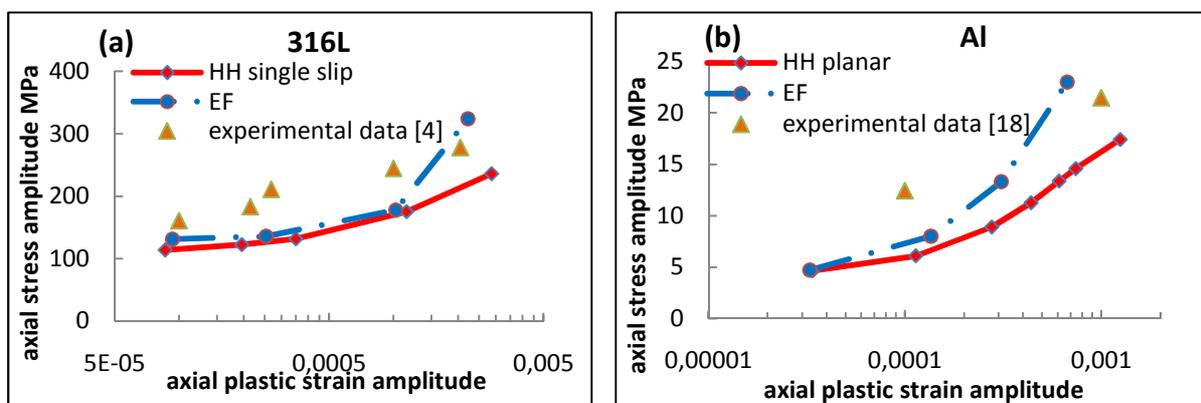


Fig. 4 - comparaison entre les courbes macroscopiques prédites par le modèle de Hill-Hutchinson, les calculs par éléments finis et les courbes expérimentales.  $q = 10^5$  et  $h_0 = 1\text{MPa}$   
(a) l'acier 316L (b) l'aluminium

## 6 Conclusion

Le modèle d'homogénéisation à champ moyen de Hill-Hutchinson a été appliqué à la prédiction du comportement macroscopique des polycristaux à structure cubique à faces centrées. Les paramètres des lois de plasticité cristalline ont été identifiés sur des monocristaux orientés pour glissement simple grâce aux courbes d'écroutissage cyclique expérimentales issues de la littérature. Les courbes d'écroutissage cyclique simulées à l'échelle de l'agrégat sont alors comparées aux résultats obtenus par calculs éléments finis et aux courbes expérimentales. La comparaison des courbes du modèle avec celles des éléments finis montre une bonne adéquation dans le cas où le glissement secondaire est autorisé. Si le glissement simple est imposé (comportement plus anisotrope), le modèle de Hill-Hutchinson prédit un comportement en accord avec l'expérience et les résultats par éléments finis pour des amplitudes de déformation plastique inférieures ou égales à  $10^{-3}$ . Pour des amplitudes supérieures, une nouvelle voie serait d'identifier les lois de plasticité cristalline sur deux populations de grains en prenant en compte aussi bien les grains orientés pour glissement simple que ceux orientés pour glissement multiple [17].

**Remerciements** : cette étude est financée par le projet CEA/MASNA visant à l'étude du comportement mécanique des matériaux métalliques pour les structures des réacteurs de génération IV

## Références bibliographiques

1. Sachs G., *Plasticity problems in metals*; 1928. **72**:743.
2. Taylor G., *Plastic strain in metals*. J. Inst. Metals; 1938; **62**; p. 307-324.
3. Sauzay M., *Habilitation à Diriger les Recherches (Université Paris 6)*; 2009.
4. Gorlier C., *Mécanismes de fatigue plastique de l'acier 316L sous formes monocristalline et polycristalline*; 1984, Thèse Ecole des Mines de Saint Etienne.
5. Kröner E., *Acta Mater.* 1961; **9**:155.
6. Eshelby J.D., *Proc. R. S. Lond.A* 1957; **241**:376.
7. Berveiller M., Zaoui A., *An extension of the self consistent scheme to plastically-flowing polycrystals*. *J. Mech. Phys.* 1979; **26**:325.
8. Hill R., *J. Mech. Phys. Sol.*, 1965; **13**:89.
9. Hutchinson J.W., *J. Mech. Phys. Sol.*, 1970; **319**:247.
10. F. Barbe, S. Forest, and G. Cailletaud, *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: Results*. *International Journal of Plasticity*, 2001; **17**:537.
11. Lebensohn R.A., Liu Y., Ponte Castañeda P., *On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations*. *Acta Materialia*, 2004; **52**:5347.
12. Li Y. , Laird C., *Cyclic response and dislocation structures of AISI 316L stainless steel. Part I: single crystals fatigued at intermediate strain amplitude*. *Materials Science and Engineering A*, 1994; **186**:65.
13. Mughrabi H., Wang R., *Cyclic stress-strain response and high-cycle fatigue behaviour of copper polycrystals*. *In Basic Mechanisms in Fatigue of Metals*, *Materials Science Monographs*, 1988; **46**: p. 1-14.
14. Buque C., Bretschneider J., Schwab A., Holste C., *Effect of grain size and deformation temperature on the dislocation structure in cyclically deformed polycrystalline nickel*. *Materials Science and Engineering A*, 2001; **319-321**:631.
15. Bretschneider J., Holste C., and Tippelt B., *Cyclic plasticity of nickel single crystals at elevated temperatures*. *Acta Materialia*, 1997; **45**:3775.
16. Pilvin P., *SIDOLO, version 2.4495, notice d'utilisation, Université de Bretagne-Sud*. 2003.
17. Sauzay M., Evrard P., Steckmeyer A., Ferrié E., *Physically-based modeling of the cyclic macroscopic behaviour of metals*. *Procedia Engineering*, 2010; **2**: 531.
18. Giese A., Styczynski A., Estrin Y., *Cyclic hardening behaviour of polycrystalline aluminium under tension-compression*. *Materials Science and Engineering A*, 1990; **124**:11.