

Force d'Eshelby et déformation propre équivalente, jeu virtuel simple de croissance ellipsoïdale cristalline

F. GUILBERT^a, M. BUISSON^b

a. 22 pl Mare des Fosses 27110 Le NEUBOURG

b. Institut Mathématique de Rennes, bât22-23 Campus de Beaulieu, 35042 RENNES

Résumé :

Notre contribution dans un travail pluridisciplinaire sur les changements de phases solide-solide cristallins utilise le tenseur énergie-impulsion d'Eshelby et l'expression de la force multiphysique associée à l'évolution et à la croissance ellipsoïdale d'une phase dans une matrice mère sollicitée macroscopiquement. Le calcul analytique est associé à l'exploitation d'un logiciel d'éléments finis pour l'instant réduits pour initiation à l'élastoplasticité: nous réalisons ainsi un premier jeu d'essai virtuel simple où la plasticité joue le rôle d'une déformation propre équivalente.

Abstract :

In a multidisciplinary work devoted to phase-transformation in crystalline solids, we use the notions of Eshelby Momentum Tensor and multiphysical forces associated with evolution and ellipsoidal growing of a phase embedded in a macroscopically loaded matrix. Analytical calculus is associated with use of a finite element code reduced for initiation purpose only to classical elastoplasticity : a first simple virtual test uses classical plasticity in order to represent an equivalent of some eigen-strain phenomena.

Mots clefs : Inclusion, Eshelby, croissance, phase

1 Introduction

Le travail présenté dans ce poster a pu se faire dans le cadre d'un stage de Master 2 dont le sujet [1] est issu du projet M3COTAM (Modélisation Multiphysique et Multiéchelle du COmportement Thermomécanique de structures en Alliages Métalliques métastables) dans le cadre de l'UEB (Université Européenne de Bretagne). Le projet M3COTAM est un projet "EPT" : Equipe de Projet Transverse de l'Université Européenne de Bretagne. Son objectif est de développer et valider une stratégie de modélisations multiphysiques et multiéchelles pour décrire à travers une démarche dite de "poupée russe" (au sens de séparation des échelles) le comportement thermomécanique d'alliages métalliques présentant des changements de phases simulés afin d'aider la conception de structures métalliques innovantes.

Plusieurs laboratoires interviennent pour ce projet M3COTAM: le LIMatB de Lorient/UBS EA4250, le LBMS/Eni Brest/EA 4325, le SCR/INSA de Rennes/UMR CNRS 6226 et l'IRMAR/Université de Rennes1/UMR 6625). Nous exposons la partie d'étude qui correspond au stage et qui s'est déroulé au sein de l'IRMAR (Institut de Recherche MATHématiques de Rennes).

L'échelle d'étude qui nous intéresse correspond au volume représentatif d'une microstructure d'un AMF telle que celle représentée par la figure 1. Cette microstructure peut subir différents phénomènes physiques qui vont engendrer une déformation du réseau cristallin de chaque grain comme notamment la transformation de phase, la plasticité ou la dilatation thermique.

D'un point de vue pragmatique, nous regroupons tous ces phénomènes dans la notion de déformation propre "eigen strain"[2] et nous préparons une première modélisation en approximant chaque grain de cette microstructure par une inclusion de forme sphérique ou ellipsoïdale incluse dans une matrice de grande taille (pour approximer une taille pratiquement infinie) par rapport à la taille de l'inclusion.

Nous adoptons ainsi une étape assez classique d'une démarche micromécanicienne en nous plaçant dans la configuration du problème d'inclusion d'Eshelby [3]. A l'aide du logiciels Abaqus un premier calcul considère une matrice sollicitée en traction pour déterminer les contraintes subies par l'inclusion et nous nous intéressons à la notion de problème d'inclusion à frontière mobile pour déterminer les forces motrices dédiées au changement de forme de l'inclusion.

2 Modélisation par le problème d'inclusion d'Eshelby

Le comportement d'un matériau peut-être modélisé à l'échelle macroscopique, c'est à dire ici à l'échelle de la structure, cette modélisation donnera la prédiction d'un comportement global. Si l'on observe le matériau à l'échelle microscopique, on voit qu'il est constitué de grains de tailles et d'orientations différentes. L'idée est de préparer la modélisation à l'échelle micro-mécanique en considérant l'évolution d'un grain dans une matrice.

On utilise tout d'abord les formules de localisation en considérant un grain unique entouré d'une matrice homogène ce qui correspond au problème de l'inclusion d'Eshelby, qui permet de calculer les contraintes et les déformations au niveau d'une inclusion dans une matrice sollicitée. Le modèle est ensuite étendu à l'évolution de forme de l'inclusion.

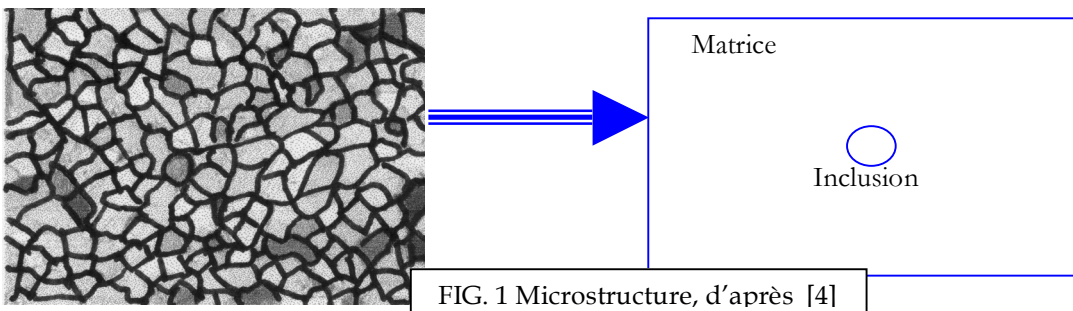
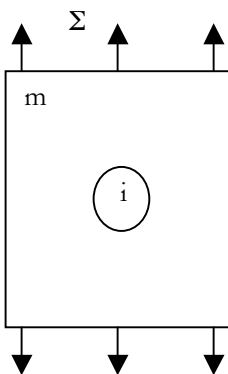


FIG. 1 Microstructure, d'après [4]

2.1 Formule de localisation



Pour ce poster, la matrice est sollicitée en contrainte uniaxiale de traction ($\underline{\Sigma} = \sigma_{zz}$).

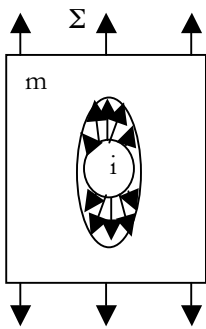
Nous supposons que le tenseur d'élasticité, \underline{C} , de la matrice et de l'inclusion sont identiques mais nous affectons seulement l'inclusion d'une déformation propre (« eigen-strain »), $\underline{\epsilon}^p$, au sens de déformation issue d'un mécanisme physique ayant son caractère propre : dilatation thermique, plasticité ou transformation de phase... D'après François et col.[5], on obtient la formule de localisation qui donne $\underline{\sigma}^i$, le tenseur des contraintes dans l'inclusion en fonction du tenseur d'Eshelby lié à la géométrie de l'inclusion et à \underline{C} (\underline{I} est une matrice identité, voir [2],[5]) :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + \underline{\underline{C}} (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{I}}) \underline{\underline{\epsilon}}^p \quad (1)$$

Notons que les champs de déformations et de contraintes sont en pratique moyennés dans l'inclusion pour se conformer à l'uniformité de ces champs comme explicité dans le problème d'inclusion ellipsoïdale d'Eshelby.

2.2 Evolution via le problème d'inclusion à frontière mobile :

Afin de modéliser l'évolution (par exemple la transformation de l'austénite en martensite), nous devons maintenant prendre en compte le changement de forme de l'inclusion lorsque la matrice est sollicitée.



Marcel Berveiller et collègues [6], [7],[8] ont étendu dès 1990 le problème d'inclusion d'Eshelby en considérant l'extension du volume ellipsoïdal sous l'action d'un phénomène de déformation propre. L'inclusion présente :

- une eigen-strain $\underline{\varepsilon}^{\text{eig}}$ différente de celle de la matrice $\underline{E}^{\text{eig}}$; $\Delta \underline{\varepsilon}^{\text{eig}} = \underline{\varepsilon}^{\text{eig}} - \underline{E}^{\text{eig}}$
- une élasticité différente de celle de la matrice : $\Delta \underline{C} = \underline{C}^{\text{I}} - \underline{C}^{\text{M}}$.
- une fraction volumique f^{I} qui exprime par exemple le ratio de phase martensitique formée dans la matrice austénitique
- une forme ellipsoïdale dont les changements d'orientations et de longueurs de ses demi-axes (a, b, c) au cours du temps modélisent l'évolution du domaine affecté par la déformation propre (la forme ellipsoïdale permet de modéliser un grand nombre de

formes d'inclusion en faisant varier les proportions entre a, b et c). Le changement de la forme de l'inclusion s'associe à la définition d'une force motrice. On peut signaler la présentation d'un tel type de force associée au changement de configuration d'une inclusion qui est celle introduite par Zaoui et col.[9] où ils écrivent que le travail nécessaire à désincruster une inclusion rigide d'une surface composite est sous la forme $dw = \underline{F} \cdot d\underline{x} + \underline{M} \cdot d\underline{q}$ où \underline{F} correspond à la force motrice d'arrachement par traction et \underline{M} correspond au moment de décohésion par pivotement. Cette force motrice est déduite de la notion de *tenseur énergie impulsion* explicitée dans [9],[3].

De façon plus générale pour le cas de phénomènes à déformations propres, l'inclusion évolue en dotant l'interface inclusion/matrice d'une vitesse propre, Sabar [10]. Les travaux de changement de volume et de forme de l'inclusion sont notamment explicités par Sabar[6,7,10] et Cherkaoui[8] pour déduire les forces motrices associées, par exemple (en homogénéité élastique) :

-la force d'évolution de la fraction volumique s'écrit :

$$\frac{1}{2} \underline{\Delta \varepsilon}^{\text{eig}} \underline{C}^{\text{M}} (\underline{S}^{\text{I}} - \underline{I}) \underline{\Delta \varepsilon}^{\text{eig}}$$

-celle associée au changement de forme de l'inclusion apparaît dans le terme extrait de l'expression de la dissipation volumique (Cherkaoui [8]) :

$$\frac{1}{2} \underline{\Delta \varepsilon}^{\text{eig}} \underline{C}^{\text{M}} \underline{\dot{S}}^{\text{I}} \underline{\Delta \varepsilon}^{\text{eig}} f^{\text{I}} \quad (2)$$

pour lequel si l'inclusion est ellipsoïdale de demi-axes a,b et c il s'agira pour nous de développer la dérivée $\underline{\dot{S}}^{\text{I}}$ du tenseur d'Eshelby puis d'en extraire (équation 2) les coefficients de \dot{a} , \dot{b} et \dot{c} définissant ainsi les forces motrices affectées respectivement à l'extension de chaque demi-axe. Sabar [6,7,10] a explicité les calculs de dérivées qui apparaissent dans l'expression de $\underline{\dot{S}}^{\text{I}}$ selon $\underline{\dot{S}}^{\text{I}} = \partial_a \underline{S}^{\text{I}} \dot{a} + \partial_b \underline{S}^{\text{I}} \dot{b} + \partial_c \underline{S}^{\text{I}} \dot{c}$; nous avons suivi une partie sa formulation et l'avons inscrite dans un programme Mathematica.

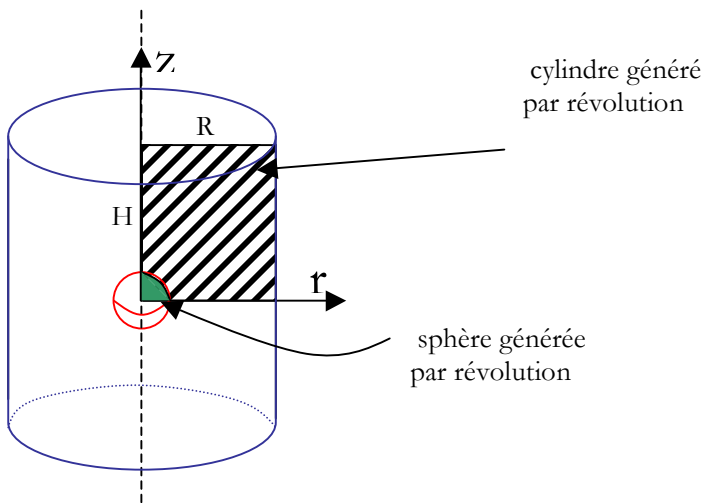
3 Calculs par éléments finis

Le terme "eigen" est un terme général adapté à un phénomène de transformation ou déformation propre. Pour notre étude nous avons utilisé la plasticité classique (de Von Mises) pour faire un premier jeu d'essai où la plasticité est la cause physique de déformation propre ; ce comportement est standard dans Abaqus.

3.1 La géométrie du problème et les conditions aux limites:

Nous cherchons à réaliser un essai de traction sur une matrice avec en son centre une inclusion sphérique; la symétrie de révolution adoptée nous permet de travailler en axisymétrie et réduit considérablement la complexité et les temps de calculs.

Sur l'interface inclusion matrice, nous assurons une continuité du vecteur contrainte (modèle « Rough ») et du vecteur déplacement (modèle « Hard contact »). Sur les faces inférieures et supérieures du cylindre nous choisissons d'imposer une force de traction ou bien un déplacement vertical; la paroi latérale du cylindre est libre d'efforts. Sur l'axe du cylindre, par symétrie, nous annulons le déplacement radial (on empêche une décohérence ou une interpénétration de matière). De même, sur le plan horizontal de symétrie, nous annulons la composante verticale du déplacement.



3.2 Le comportement du matériau :

Nous utilisons la routine standard de plasticité de Von Mises implantée dans Abaqus ; pour l'inclusion, le comportement

est élasto-plastique parfait, $\underline{\underline{\sigma}}^I = \underline{\underline{C}}^I (\underline{\underline{\varepsilon}}^I - \underline{\underline{\varepsilon}}^P)$ ainsi que pour la matrice $\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{C}}^m (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{E}}^P)$.

3.3 Uniformité des champs dans l'inclusion, ratio inclusion/matrice et maillages:

Un premier problème classique d'inclusion d'Eshelby fait intervenir une inclusion homogène (ellipsoïdale ou sphérique) élastoplastifiée plongée dans une matrice infinie de même tenseur d'élasticité : Eshelby montre que les champs de déformations et de contraintes sont uniformes dans l'inclusion. Dans un premier temps il faut évaluer si cette propriété d'uniformité est respectée par la modélisation par éléments finis et il faut choisir un ratio correct entre la taille de l'inclusion et le maillage (nécessairement fini) environnant l'inclusion et représentant la matrice théoriquement infinie.

Le maillage : il existe beaucoup de choix de types de maillage. Nous avons d'abord utilisé le maillage simple de type CAX4R à éléments quadratiques pour limiter les temps de calcul et le temps d'exploitation des résultats (C : Continuum stress/déplacement : le déplacement et la contrainte sont continus ; AX : Axisymétrique ; 4 : 4noeuds ; R : Reduced integration) mais nous avons aussi testé d'autres types d'éléments (CAX4, CAX8, CAX8R, CAX3, CAX6M).

Par exemple, en milieu isotrope, pour une contrainte de traction uniaxiale $\sigma_{zz} = 2,3 \cdot 10^8$ MPa (sachant que la limite élastique de l'inclusion est fixée à $2,0 \cdot 10^8$ MPa), on obtient la figure page suivante pour le quart de l'inclusion (zone rouge vue la symétrie de révolution et la symétrie par rapport au plan horizontal) où 21 mailles dessinent l'inclusion. Pour évaluer l'uniformité d'un champ dans l'inclusion, pour les CAX4R, il faut donc relever les 21 valeurs correspondantes car il y a 21 éléments dans l'inclusion et il n'y a qu'un point d'intégration par élément: nous avons convenu de se baser sur le calcul d'erreur relative $\left(\frac{\text{valeur maximale} - \text{valeur minimale}}{\text{valeur maximale}} \right)$ comme *évaluateur* ; nous avons aussi noté (pour l'essai de traction) que les termes non diagonaux des différents tenseurs (contrainte, déformations) sont négligeables devant les diagonaux : les erreurs relatives sont de l'ordre de 0.1%, la plus grande, 1.6% correspond à $\varepsilon_{\theta\theta}^P$.

Le ratio inclusion/matrice : nous avons étudié l'impact de la taille de l'inclusion sur l'uniformité des champs de contraintes par l'examen de neuf différents ratios inclusion/matrice (entre 1/2 et 1/40ème, ratio = rayon de l'inclusion sur rayon de la matrice (la matrice étant cylindrique pour nos essais)). Avec le même évaluateur, il est convenu de choisir le ratio de 1/5ème pour réaliser la majeure partie de nos calculs (erreur de l'ordre de 0.1%).

4 Jeux d'essai : la sphère croît en un ellipsoïde.

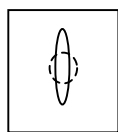
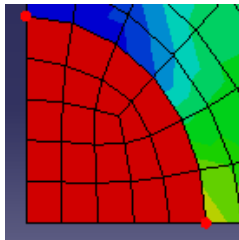
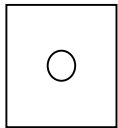
Nous effectuons un test de traction z-uniaxial et nous avons choisi d'avoir la même élasticité isotrope pour les 2 phases en renseignant dans Abaqus le module d'Young équivalent, $E = 210$ GPa, ainsi que le coefficient de poisson $\nu = 0,3$ (valeurs empruntées aux aciers usuels). La matrice est composée d'un matériau à comportement purement élastique et l'inclusion, initialement sphérique (rayon R), est composée d'un matériau à comportement élasto-plastique parfait avec une limite élastique $\sigma_y = 200$ MPa.

Formule de localisation: au delà du seuil d'élasticité, l'inclusion se plastifie et la simulation via Abaqus nous donne ε^p ainsi que σ^l dans l'inclusion. Nous comparons cette contrainte avec la formule de localisation (1) implantée sous Mathematica ; l'évaluateur nous donne les erreurs suivantes :

$$\sigma_{rr}^l \rightarrow 1.8\% , \sigma_{\theta\theta}^l \rightarrow 2.3\% , \sigma_{zz}^l \rightarrow 0.3\% .$$

Changement de forme: sous l'essai de traction, la sphère se transforme par plasticité en un ellipsoïde. Nous étudions l'action des forces motrices respectivement selon l'axe r et l'axe z qui, de par la charge de traction sont corrélées à la progression du changement de forme. Pour notre étude, les forces motrices servent à évaluer des tendances vers lesquelles la forme de l'inclusion évoluera (reste-t-elle sphérique ou est-ce un demi axe qui va croître ?). Cette étude devra être complétée par la construction de *domains seuils* (pour ces forces motrices) associés à des *critères d'évolution de forme* de l'inclusion représentant la zone sous déformation propre ; actuellement, la campagne des essais expérimentaux est en cours en M3COTAM. Dans l'état, nous mettons simplement en évidence un lien entre force motrice et changement de forme de l'inclusion : tout se passe comme si des forces motrices selon les 3 axes de l'ellipsoïde provoquaient des déplacements axiaux des sommets de cet ellipsoïde (évolution des demi-axes $R \rightarrow a$, $R \rightarrow b$ et $R \rightarrow c$; nous ne regardons pas les rotations vu la symétrie du problème simple).

Les 2 sommets (points rouges ci-dessous, c sur l'axe vertical, a sur l'axe horizontal) sont suivis pour le calcul



des déplacements (plastiques) de transformation sous l'action des forces motrices. L'évaluation des déplacements plastiques se fait comme suit : pour une sollicitation valant 200 MPa, il n'y a pas de déformation résiduelle, le déplacement plastique approché vaut zéro et cette configuration sert de référence approchant la partie élastique du déplacement. Dès la limite macroscopique élastique, il y a bien évolution irréversible de forme de l'inclusion, nous repérons les déplacements des points rouges en faisant la différence entre la configuration élastique initiale et la configuration ellipsoïdale élastoplastique finale : nous assimilons cette différence comme représentant approximativement le déplacement par « transformation » plastique (« eigen-displacement »).

Résultats: nous avons constaté [1] que le déplacement du point c est un allongement du demi-axe vertical proportionnel à la force de traction σ_{zz} que nous avons fait varier de 200 Mpa à 1000 MPa ; de même pour le sommet a (mais c 'est un rétrécissement du demi-axe horizontal) . La relation est linéaire puisque la liaison entre l'inclusion et la matrice est continue d'une part et que, d'autre part, le déplacement dans la matrice est de la forme $E_{ij} x_j$ (convention de sommation) où E_{ij} représente la déformation macroscopique proportionnelle à la contrainte macroscopique σ_{zz} .

De plus, nous vérifions aussi que la force motrice extraite de la formule (2) est proportionnelle au carré de la variation de longueur du demi-axe correspondant . Par exemple, dans le cas du test de traction et pour une plasticité *isovolume* le coefficient de \dot{c} issu de (2) représente la force motrice (volumique, [8]) F_C

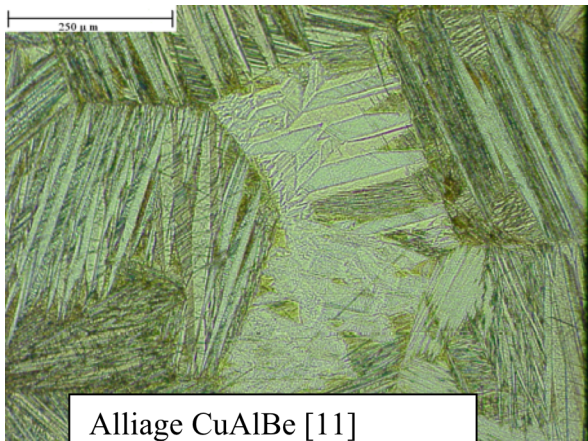
d'accroissement du demi-axe c ; elle s'écrit : $F_C = \frac{(5 - 7\nu) E}{35 \cdot (1 - \nu^2)} \cdot \frac{f^I}{R} \cdot (\Delta \varepsilon_{33}^p)^2$ et en remplaçant $\Delta \varepsilon_{33}^p$ par

$\frac{\Delta c}{R}$ nous obtenons bien la forme quadratique $F_C = \alpha \cdot (\Delta c)^2$. De plus, pour une fraction initiale f^I choisie ici correspondante au maillage de ratio 1/5 entre l'inclusion et la matrice , nous obtenons, pour $R \approx 6$ mm, par

Abaqus un coefficient $\alpha \approx \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\text{N}}{\text{mm}^3} / \text{mm}^2 \right)$ cohérent avec l'expression analytique quadratique .

5 Conclusion, perspectives, remerciements.

Pour ce travail d'initiation, nous avons obtenu une corrélation assez bonne entre les modèles de base de micromécanique d'Eshelby et la simulation via le logiciel Abaqus. Nous avons fait en sorte de limiter les erreurs provenant de la géométrie du modèle par un choix adapté du ratio inclusion/ matrice (*cela ne fige pas les fractions volumiques des phases*). Une analyse critique est aussi menée dans [1] où il est montré plus de détails sur certains paramètres tels que le poids des éléments liés à leurs volumes, les composantes non diagonales des différents tenseurs, ainsi que le choix des éléments du maillage ou le nombres d'incrément



Alliage CuAlBe [11]

du calcul ; un comportement élastoplastique avec écrouissage est aussi inclus. Nous avons ainsi participé à la mise en place d'un modèle de comportement de matériaux à transition de phase solide/solide à l'échelle du grain. C'est une première modélisation quasistatique d'une inclusion d'Eshelby élastoplastique parfaite dans une matrice élastique pure sollicitée en traction où la plasticité joue le rôle d'une déformation propre. Nous proposons d'appréhender l'évolution de la géométrie de l'inclusion par l'usage de la notion de problème d'inclusion à frontière mobile et de ses forces motrices associées : il convient de construire le modèle permettant de gérer les forces motrices associées à l'évolution des dimensions de l'inclusion ; l'implanter sous Abaqus via des sub-routines types UMAT ou VMAT ; confronter avec les campagnes expérimentales et les problèmes de structures avancées. **Il faut souligner aussi l'importance des interfaces** (voir figure ci-contre transmise à cette intention par [11]) .

Le financement du stagiaire était une AREF associée au service formation continue de l'université de Rennes1. Les auteurs ont pu utiliser les logiciels Simulia/Abaqus et Wolfram-Research/Mathematica pour apporter une contribution au sein de la dynamique équipe de l'UEB/M3COTAM qui a gérée les missions de concertations et études.

References

- [1] Guilbert F., Transition de phase austenite/martensite et plasticité: etude micromécanique via la notion de deformation proper ("eigen strain"); rapport de stage de master2 ingénierie mécanique, Université de Rennes1/Service Formation Continue.
- [2] Mura T., Micromechanics of Defects in Solids, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, 1987.
- [3] Markenscoff X., Gupta A. (éditeurs), Collected Works of J.D. Eshelby, The Mechanics of Defects and Inhomogeneities, Springer, 2006.
- [4] Patoor E., Modélisation du comportement mécanique des matériaux : prise en compte des changements de phases, colloque Mecamat, Aussois 2009.
- [5] François D., Zaoui A., Pineau A., Comportement mécanique des matériaux, élasticité et plasticité, Hermès, Paris, 1995.
- [6] Sabar H., Problèmes d'inclusion à frontières mobiles et applications, thèse , Université de Metz, 1990.
- [7] Sabar H., Buisson M., Berveiller M., The Inhomogeneous and Plastic Inclusion Problem with Moving Boundary, Int. J. of Plasticity, 7, pp. 759-779, 1991.
- [8] Cherkaoui M., Berveiller M., Lemoine X., Coupling between plasticity and martensitic phase transformation : overall behavior of polycrystalline TRIP steels, Int. J. of Plasticity, 16, pp. 1215-1241, 2000.
- [9] Ambroise M.H., Bretheau T., Zaoui A., Sune une notion de "torseur de configuration" caractérisant les interactions élastiques entre inclusion et matrice, C. R. Acad. SC. Paris, t.304, Série II, N°7, 1987.
- [10] Sabar H., Berveiller M., Buisson M., Problème d'inclusion à frontière mobile, C. R. Acad. SC. Paris, t.310, Série II, pp 447-452, 1990.
- [11] Arbab Chirani S., Martensite auto-accommodée, alliage CuAlBe, LBMS EA 4325.