

Identification d'un modèle de plasticité cristalline à partir de mesures de champs multimodales

M. Ben Azzouna^a, W. Chow^b, V. Aubin^c, G. Puel^d

Laboratoire MSSMat - CentraleSupélec - CNRS UMR 8579
Université Paris-Saclay

a. mouli.ben-azzouna@centralesupelec.fr

b. wang.chow@centralesupelec.fr

c. veronique.aubin@centralesupelec.fr

d. guillaume.puel@centralesupelec.fr

Résumé :

À partir d'essais de traction sur une éprouvette en alliage d'aluminium (5052) réalisés in-situ dans un diffractomètre, des mesures de champs de déformation élastique ont été effectuées et des champs de déplacement ont été mesurés par corrélation d'images numériques sur la surface de l'échantillon. Des simulations de cet essai ont ensuite été réalisées avec une loi de plasticité cristalline pour permettre l'identification, par une approche inverse, des paramètres constitutifs.

Mots clés : Recalage de modèle éléments finis, identification inverse, mesures de champs, diffraction des RX, perturbations de mesure

1 Introduction

Dans le domaine de la caractérisation des matériaux, l'identification de certaines lois de comportement demeure délicate surtout pour des comportements non linéaires. Plusieurs stratégies d'identification ont été développées dans ce sens. Elles s'appuient principalement sur le dialogue essai-calcul : une partie expérimentale consiste à mesurer une ou plusieurs quantités physiques qui exhibent le comportement souhaité du matériau testé, tandis que la partie théorique permet de calculer ces mêmes composantes. C'est enfin un certain accord entre ces quantités d'origines différentes qui doit permettre de remonter aux propriétés matérielles recherchées.

On s'intéresse dans notre étude aux matériaux polycristallins. Ces derniers sont souvent modélisés à travers des lois de plasticité cristalline qui permettent de prédire l'évolution de la microstructure [1, 2] ainsi que le comportement mécanique sous chargements complexes [3, 4]. L'intérêt sera porté en particulier sur la loi de plasticité cristalline proposée par [5, 6, 7, 8]. En plus de l'aspect non linéaire de ces lois, l'étape d'identification, souvent basée sur des approches inverses, doit idéalement tenir compte des hétérogénéités des champs de déformation, lesquelles proviennent principalement du comportement à l'échelle des grains. L'utilisation des mesures de champs répond à ce besoin grâce à la richesse de ces mesures permettant d'extraire plus d'informations des essais mécaniques. L'expansion de leur utilisation a conduit au développement de plusieurs méthodes d'identification dédiées ou adaptées aux mesures de champs [9, 10].

Dans ce contexte, et afin de caractériser la plasticité cristalline, on se propose d'utiliser deux types de mesures de champs : des mesures de champs cinématiques en surface obtenues à différents incréments de l'expérience par corrélation d'images numériques (CIN) [11, 12, 13], et des mesures de champs de déformation élastique obtenues par diffraction des rayons X (DRX) à certains des incréments de l'expérience. La DRX est également utilisée ici pour déterminer la microstructure expérimentale ainsi que les orientations cristallographiques, requises pour mener à bien le dialogue essai-calcul.

2 Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental mis au point (FIGURE 1) consiste à mener quelques essais statiques de traction sur une éprouvette mince d'aluminium et est constitué de :

- un diffractomètre *Panalytical X'Pert Pro MRD*, tension : 45 kV, intensité : 40 mA ;
- une micro-machine de traction *Deben*, charge maximum : 1 kN ;
- un appareil photo reflex numérique *Canon D70*.

Des mesures par DRX permettent à la fois de déterminer les orientations des grains et de mesurer localement des déformations élastiques au sein des grains via la loi de Bragg et la première méthode d'Ortner [14]. En parallèle, des champs cinématiques sont mesurés par une méthode globale de CIN [13] à partir d'images prises par un appareil photo tout au long de l'essai. Au vu de la texture naturelle non adaptée du matériau, un mouchetis a été déposé sur la surface observée de l'éprouvette préalablement à l'essai.

Le matériau choisi est un alliage d'aluminium (5052) avec 3% de magnésium. Ses grains ont été grossis (5 à 20 μm) par recristallisation après écrouissage critique [15]. L'éprouvette testée, de dimensions 18 mm \times 9 mm \times 0.55 mm contient 10 à 12 grains par face et 2 grains dans l'épaisseur (FIGURE 2). Ces choix répondent à plusieurs besoins comme une limite élastique du matériau en

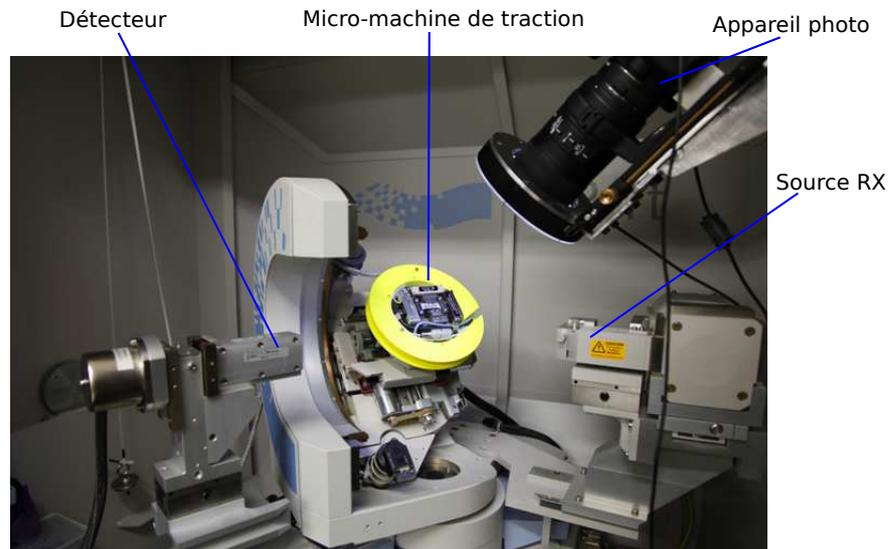


FIGURE 1 – Dispositif expérimental

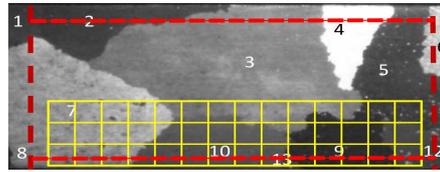
adéquation avec les capacités de la micro-machine de traction ou encore des paramètres géométriques permettant de mener à bien les simulations numériques. En effet, il s'avère que les résultats des simulations dépendent de la forme tridimensionnelle des grains sous la surface ainsi que des conditions aux limites [16, 17], d'où l'intérêt d'avoir de gros grains et un nombre de grains limité dans l'épaisseur.

L'essai est mené jusqu'à 3.5% de déformation totale (FIGURE 3). Les mesures de champs par CIN sont effectuées pour tous les incréments (\times , \times). Trois mesures DRX sont effectuées (\bullet) : une première mesure au tout début de l'essai, et deux autres à $\epsilon = 0.7\%$ et $\epsilon = 3.5\%$.

3 Simulation de l'expérience

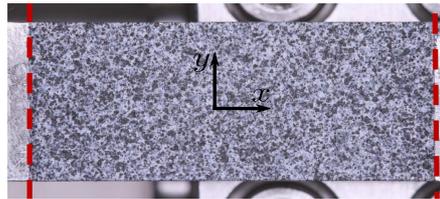
3.1 Modèle de plasticité cristalline

Dans le cas d'un matériau à symétrie CFC, le comportement élastique est décrit par trois constantes C_{11} , C_{12} et C_{44} . L'aluminium étant supposé isotrope, soit un coefficient d'anisotropie $a = (C_{11} - C_{12})/2C_{44} = 1$, les trois constantes s'expriment en fonction du module d'Young E et du coefficient de Poisson ν , ou



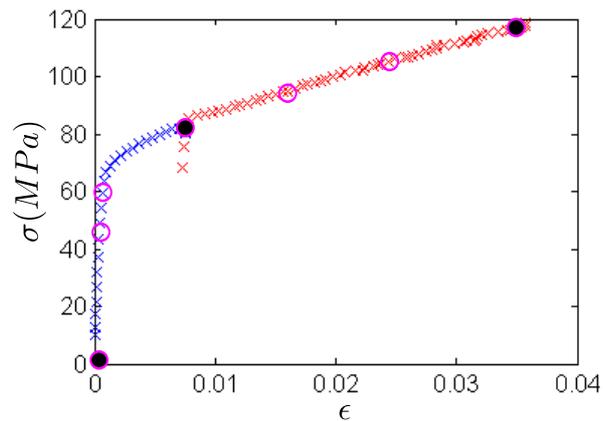
(a) Différents grains de la face photographiée de l'éprouvette

-- région d'étude CORRELIQ4
 ☐ grille de mesure DRX



(b) Mouchetis : la taille du pixel correspond à une longueur physique de $96\mu m$

FIGURE 2 – Essai de traction sur l'éprouvette testée



● mesures de DRX
 ○ incréments de calcul dans la simulation EF

FIGURE 3 – Courbe expérimentale contrainte-déformation

encore en fonction des coefficients de Lamé λ et μ , comme :

$$C_{12} = \lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (1a)$$

$$C_{44} = \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (1b)$$

$$C_{11} = \lambda + 2\mu = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (1c)$$

Le modèle de plasticité cristalline utilisé est une loi viscoplastique déduite de la théorie des dislocations [5, 6, 7, 8] et définie pour chaque système “s” parmi les 12 systèmes de glissement d’un cristal CFC (caractérisés par la normale au plan de glissement \underline{n}^s et la direction de glissement \underline{m}^s) :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left[\frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right]^n \text{sgn}(\tau^s) \quad (2)$$

où n est un coefficient de sensibilité à la vitesse qui dépend de la température, τ^s est la cission réduite, τ_c^s est la cission réduite critique et $\dot{\gamma}^s$ est la vitesse de glissement du système “s” (dérivée temporelle de l’amplitude du glissement). $\dot{\gamma}_0$ est une valeur-test de $\dot{\gamma}^s$.

D’après le critère de Schmid, le système de glissement “s” est actif si la cission réduite est supérieure ou égale à la cission critique de ce système :

$$\gamma^s \begin{cases} \neq 0 & \text{si } \tau^s = (\underline{\sigma} \cdot \underline{n}^s) \cdot \underline{m}^s \geq \tau_c^s \\ = 0 & \text{si } \tau^s < \tau_c^s \end{cases} \quad (3a)$$

$$(3b)$$

où $\underline{\sigma}$ est la contrainte macroscopique appliquée.

La cission critique s’exprime ici en fonction des densités de dislocations ρ^s pour chaque système de glissement “s” [18] :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \quad (4)$$

où μ est le module de cisaillement isotrope, b est la norme du vecteur de Burgers et a^{su} est une composante de la matrice d’interaction des dislocations traduisant les interactions entre les systèmes “s” et “u” [19].

Les densités de dislocation en un point évoluent avec la déformation. Il est donc nécessaire d’introduire une loi donnant l’évolution de ces densités de dislocations au cours de la déformation :

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(\frac{\sum_{u \neq s} \rho^u}{K} - 2 y_c \rho^s \right) \quad (5)$$

avec y_c la distance d’annihilation de deux dislocations et K un paramètre matériau lié au parcours moyen des dislocations.

3.2 Modélisation par éléments finis

Une modélisation 3D de l’expérience a été réalisée en s’appuyant sur l’orientation et la géométrie des grains de chacune des deux faces sous Abaqus. Les grains de chaque face sont alors extrudés jusqu’à la moitié de l’épaisseur de l’éprouvette. La FIGURE 4 montre le maillage et les différents grains sur les deux faces de l’éprouvette simulée. Le grain multicolore sur la face 2 (FIGURE 4(b)) correspond à un grain qui ne s’est pas bien recristallisé. Il a alors été modélisé

avec une orientation différente pour chaque élément de maillage. Chaque grain contient 3 éléments dans l'épaisseur, ce qui donne un total de six éléments dans l'épaisseur pour toute l'éprouvette. Des conditions aux limites hétérogènes de type Dirichlet sont appliquées sur tous les bords de l'éprouvette à partir des mesures de déplacement par CIN. Les déplacements sont alors projetés du maillage CORRELI^{Q4} [13] vers le maillage réalisé sous Abaqus. Le modèle de plasticité cristalline (2, 3, 4, 5) est introduit dans le logiciel EF Abaqus via une procédure UMAT (user material) en utilisant le formalisme des transformations finies proposé par [20, 21]. Six incréments de calcul statique sont introduits jusqu'à 3.5% de déformation totale (points \circ et \bullet de la FIGURE 3). Les calculs EF ont été

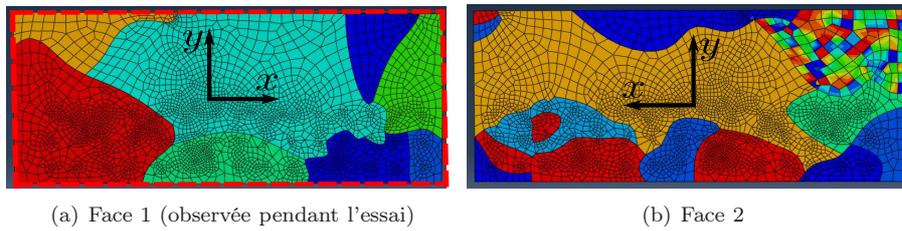


FIGURE 4 – Maillage EF

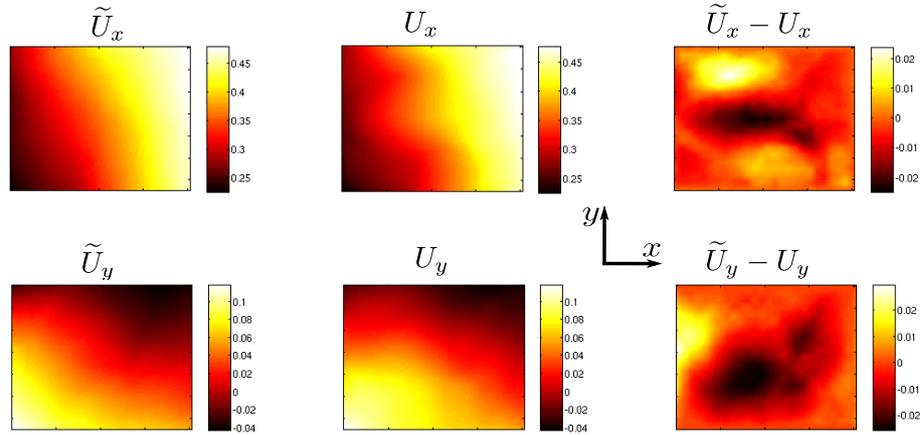
lancés avec un jeu initial de paramètres matériau pour l'aluminium [22] donné dans le TABLEAU 1.

E (MPa)	ν	$\dot{\gamma}_0$ (s ⁻¹)	τ_0 (MPa)	ρ_0 (mm ⁻²)
70000	0.33	$7.5 \cdot 10^{-6}$	0.2	10^{-6}
$2 y_c$ (mm)	b (mm)	n	K	
$2.86 \cdot 10^{-6}$	$2.8 \cdot 10^{-7}$	200	56	

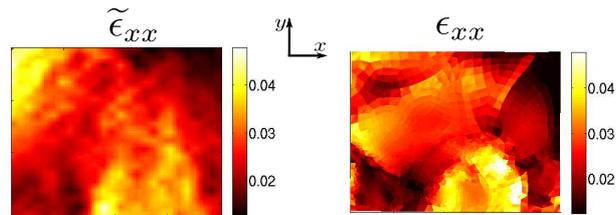
TABLEAU 1 – Valeurs initiales des paramètres constitutifs

avec ρ_0 la densité de dislocation initiale identique pour tous les systèmes "s". Seule la moitié de droite de l'éprouvette ($x > 0$) a été simulée afin de simplifier l'analyse dans un premier temps. La FIGURE 5(a) représente les champs de déplacement mesurés (\tilde{U}_x, \tilde{U}_y) et calculés (U_x, U_y), ainsi que la différence entre les deux. Les champs de déplacement calculés sont ici projetés sur la grille de mesure. Concernant les champs de déformation longitudinale, les champs mesuré $\tilde{\epsilon}_{xx}$ et calculé ϵ_{xx} sont montrés FIGURE 5(b). La taille d'élément choisie pour la simulation est un peu grossière et ne permet pas de représenter finement les gradients observés expérimentalement. Cette taille d'élément résulte d'un compromis entre le temps de calcul et la finesse des résultats attendus. Dans un objectif d'analyse de sensibilité des champs de surface aux paramètres,

nous avons privilégié le premier critère. Au vu de ces résultats, il semble que les valeurs des paramètres initiaux restent à affiner malgré une concordance qualitative des champs.



(a) Champs de déplacement mesurés \tilde{U}_x , \tilde{U}_y et calculés U_x , U_y (en mm)



(b) Champs de déformation longitudinale mesuré $\tilde{\epsilon}_{xx}$ et calculé ϵ_{xx}

FIGURE 5 – Champs de déplacement et de déformation mesurés et calculés pour une déformation macroscopique de 3.5%

4 Identification par approche inverse

La stratégie d'identification définie dans cette étude est basée sur les principes de la méthode du recalage par éléments finis [23] ou FEMU (Finite Element Model Updating) et a été choisie pour mener la comparaison mesures-simulation en prenant en compte les différents types de mesure disponibles.

4.1 Principe du recalage par éléments finis

Le principe de la méthode FEMU est de construire, à paramètres matériau fixés $\underline{\theta}$, un problème direct bien posé en utilisant les données disponibles (théo-

riques et expérimentales). La résolution de ce problème donne les champs de déplacement et de déformation qui seront comparés aux champs mesurés. L'étape d'identification consiste alors à minimiser l'écart quadratique entre champs calculés et mesurés :

- Définir un calcul EF à partir des informations disponibles pour $\underline{\theta}$ fixé, donnant dans notre cas les champs : U , ϵ et ϵ^e .
- Minimiser une fonction coût \mathcal{J} basée sur la distance entre les champs calculés ($U(\underline{\theta})$, $\epsilon(\underline{\theta})$, $\epsilon^e(\underline{\theta})$) et les champs mesurés (\tilde{U} , $\tilde{\epsilon}$, $\tilde{\epsilon}^e$), définis ici sur les différentes grilles de mesure. Les déplacements, les déformations totale et élastique, ou une combinaison de ces différents champs peuvent être utilisés à cet effet. Une forme classique d'une fonction coût FEMU peut s'écrire comme suit :

$$J(\underline{\theta}) = \frac{1}{2}(\Pi X(\underline{\theta}) - \tilde{X})^\top B (\Pi X(\underline{\theta}) - \tilde{X}) \quad (6)$$

où X est le champ considéré, B est la matrice associée à la norme choisie pour la fonction coût, et Π un projecteur de la quantité X du maillage EF vers la grille de mesure.

Dans notre cas de figure, on veut utiliser le champ de déplacement \tilde{U} ou de déformation totale $\tilde{\epsilon}$, avec le champ de déformation élastique $\tilde{\epsilon}^e$. Dans ce cas, la fonction coût peut avoir la forme suivante :

$$J(\underline{\theta}) = \underbrace{\frac{1}{2}(\Pi \epsilon(\underline{\theta}) - \tilde{\epsilon})^\top (\Pi \epsilon(\underline{\theta}) - \tilde{\epsilon})}_{J_1} + \eta \underbrace{\frac{1}{2}(\Pi \epsilon^e(\underline{\theta}) - \tilde{\epsilon}^e)^\top (\Pi \epsilon^e(\underline{\theta}) - \tilde{\epsilon}^e)}_{J_2} \quad (7)$$

où η est le ratio des poids affectés aux deux termes de la fonction coût.

4.2 Test et étude d'une fonction coût

Un première fonction coût a été écrite, basée sur l'écart quadratique entre les champs de déformation totale (les trois composantes $(\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{xy})$) mesurés et calculés (J_1). Dans un premier temps, on se limite à cinq paramètres θ pour l'identification : K , n , $\dot{\gamma}_0$, τ_0 et y_c . Le test vise à identifier les valeurs de référence respectives citées dans le TABLEAU 1 et vérifier la convexité de la fonction coût et sa robustesse vis-à-vis des perturbations de mesure. Un bruit aléatoire a été ajouté au champ de référence ϵ_0 tel que :

$$\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}_0 + \delta\tilde{\epsilon} \quad (8)$$

Les perturbations synthétiques $\delta\tilde{\epsilon}$ sont représentées par un bruit blanc Gaussien d'amplitude 10% de la moyenne des champs de déformation.

Les fonctions coût relatives à chacun des cinq paramètres ont été obtenues par l'évaluation sur une grille de valeurs, en fixant les autres paramètres à leurs

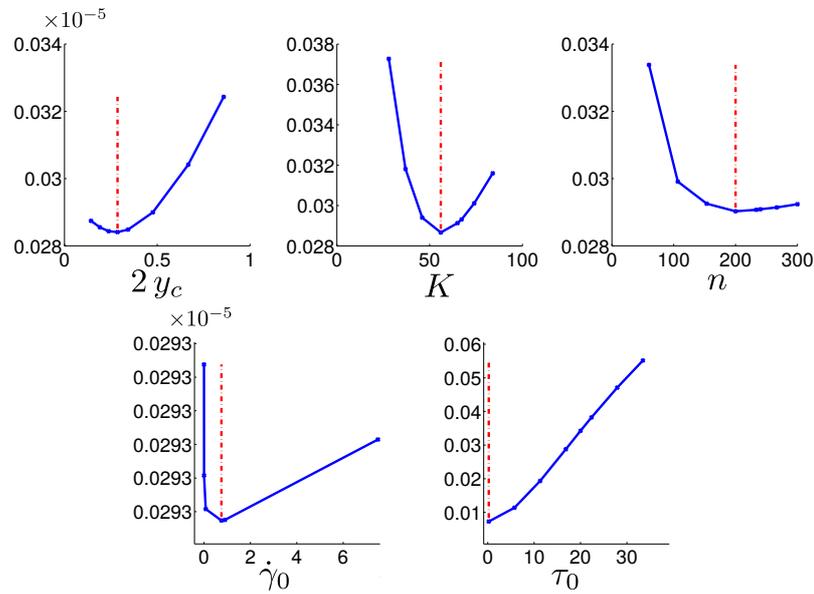


FIGURE 6 – Évaluation de la fonction coût J_1 pour une amplitude de bruit de 10%

valeurs de référence. La FIGURE 6 illustre la convexité de la fonction coût et la sensibilité des déformations vis-à-vis de chacun des paramètres recherchés, ce qui laisse présager leur bonne identifiabilité. Une analyse de sensibilité des champs cinématiques avec la méthode des différences finies confirme ce résultat pour l'ensemble des paramètres recherchés.

5 Conclusion et perspectives

Nous avons présenté une approche d'identification d'une loi de plasticité cristalline basée sur l'exploitation de mesures de champs et les principes du recalage par éléments finis. L'approche a été testée pour des mesures de déformation totale sur un test numérique. Un essai de traction a été mené sur une éprouvette à taille de grains contrôlée et les champs cinématiques calculés ont été comparés qualitativement aux champs expérimentaux. Cette première étude est probante pour l'application aux mesures expérimentales.

Les perspectives sont de prendre en compte les mesures de déformation élastique dans la fonction coût et d'appliquer la stratégie aux données expérimentales dont on dispose. Des comparaisons entre différentes fonctions coût et différentes normes seront effectuées pour optimiser la robustesse de l'identification. La qualité des paramètres identifiés sera ensuite mise à l'épreuve avec différents essais.

Références

- [1] Eriean P., Rey C. Modelling of deformation and rotation bands and of deformation induced grain boundaries in IF Steel aggregate during large plane strain compression. *International Journal of Plasticity* **20** 1763-1788. 2004
- [2] Solas D., Tomé C. N. Texture and strain localization prediction using a N-site polycrystal model. *International Journal of Plasticity* **17** 737-753. 2001
- [3] Evrard P., Aubin V., Pilvin Ph., Degallaix S., Kondo D. Implementation and validation of a polycrystalline model for a bi-phased steel under non-proportional loading paths. *Mechanics Research Communications* **35**(5) 336-343. 2008
- [4] Evrard P., Alvarez-Armas I., Aubin V., Degallaix S. Polycrystalline modeling of the cyclic hardening/softening behavior of an austenitic-ferritic stainless steel. *Mechanics of Materials* **42**(4) 395-404. 2010
- [5] Kocks U. F., Argon A. S., Ashby M. F. Thermodynamics and kinetics of slip. *Progress in Materials Science (Pergamon Press, Oxford)* **19**. 1975
- [6] Mecking H., Kocks U. F. Kinetics of flow and strain hardening. *Acta Metallurgica* **29** 1865-1875. 1981
- [7] Rauch E. Etude de l'écroûissage des métaux, aspects microstructuraux et lois de comportement. *HDR, Institut National Polytechnique de Grenoble* 1993
- [8] Schwartz J., Fandeur O., Rey C. Fatigue crack initiation modeling of 316LN steel based on non local plasticity theory. *Procedia Engineering* **2**(1) 1353-1362. 2010
- [9] Avril S., Bonnet M., Bretelle A-S., Grédiac M., Hild F., Jenny P., Latourte F., Lemosse D., Pagano S., Pagnacco E., Pierron F. Identification from measurements of mechanical fields. *Experimental Mechanics* **48** 381-402. 2008
- [10] Grédiac M., Hild F. Full-Field Measurements and Identification in Solid Mechanics. *Wiley* 2012
- [11] Chu T. C., Ranson F., Sutton M. A. Applications of digital-image-correlation techniques to experimental mechanics. *Experimental Mechanics* **3** 232-244. 1985
- [12] Kobayashi A. S. Handbook on Experimental Mechanics. *Wiley, New York* 1987
- [13] Hild F., Roux S. Digital image correlation : from displacement measurement to identification of elastic properties - a review. *Strain* **42** 69-80. 2006
- [14] Ortner B. The choice of lattice planes in X-ray strain measurements of single crystals. *Advances in X-Ray Analysis* **29** 113-118. 1986

-
- [15] Chow W., Solas D., Puel G., Perrin E., Baudin T., Aubin V. Measurement of complementary strain fields at the grain scale. *Advanced Materials Research* **996** 64-69. 2014
- [16] Héripéré E., Dexet M., Crépin J., Gélébart L. Roos A., Bornert M., Caldemaison D. Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials. *International Journal of Plasticity* **23**(9) 1512-1539. 2007
- [17] Evrard P., El Bartali A., Aubin V., Rey C., Degallaix S., Kondo D. Influence of boundary conditions on bi-phased polycrystal microstructure calculation. *International Journal of Solids and Structures* **47**(16) 1979-1986. 2010
- [18] Tabourot L., Fivel M., Rauch E. Generalised constitutive laws for F.C.C. single crystals. *Materials Science and Engineering : A* **234-235** 639-642. 1997
- [19] Franciosi P. Glide mechanisms in B.C.C. crystals : an investigation of the case of iron through multislip and latent hardening tests. *Acta Metallurgica* **31** 1331-1342. 1983
- [20] Peirce D., Asaro R. J., Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metallurgica* **31** 1951-1976. 1983
- [21] Teodosiu C., Raphanel J. L., Tabourot L. Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals. *MECAMAT'91, (Teodosiu, Raphanel and Sidoroff Editors), Balkema, Rotterdam* 153-160. 1993
- [22] Dumoulin S. De l'utilisation d'une loi monocristalline en vue de la caractérisation du comportement plastique du multicristal d'aluminium. *Ph.D. thesis (Université de Savoie)*. 2010
- [23] Collins Jon D., Hart Gary C., Haselman T. K., Kennedy B. Statistical identification of structures. *The American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal* **12**(2) 185-190. 1974