

Influence de la microstructure intragranulaire sur l'évolution des surfaces de charge d'un acier ferritique lors de trajets de déformation monotones et complexes

Gérald Franz¹, Farid Abed-Meraim¹, Tarak Ben Zineb², Xavier Lemoine³, Marcel Berveiller¹

1 LPMM, Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux, UMR CNRS 7554

ENSAM 4 rue Augustin Fresnel, 57078 Metz Cedex 3, France

2 LEMTA, Laboratoire d'Énergétique et de Mécanique Théorique et Appliquée, UMR CNRS 7563

ESSTIN UHP 2 rue Jean Lamour, 54519 Vandœuvre-lès-Nancy, France

3 Centre Automobile Produit, Arcelor Research S.A.

voie Romaine B.P. 30320, 57283 Maizières-lès-Metz, France

gerald.franz@metz.ensam.fr

Résumé :

Deux modèles micromécaniques de comportement élastoplastique, développés en adoptant une formulation en transformations finies et couplés à une technique de transition d'échelle autocohérente, sont utilisés pour étudier l'évolution des surfaces de charge d'un acier ferritique polycristallin lors de changements de trajets de déformation. L'importance de l'impact de la microstructure intragranulaire sur l'anisotropie du comportement lors de trajets complexes est montrée par l'intégration de la modélisation de la microstructure intragranulaire dans l'un de ces modèles.

Abstract :

Two micromechanical elastic-plastic behaviour models, developed within the framework of finite transformations and coupled with self consistent scale transition approach, are used to study the evolution of yield surfaces of polycrystalline ferritic steels during strain path changes. The importance of the impact of intragranular microstructure on behaviour anisotropy under complex loadings is shown thanks to the introduction of intragranular microstructure modelling in one of these models

Mots-clefs :

Microstructure ; Surface de charge ; Modélisation micro-macro

1 Introduction

La prédiction des surfaces de charge et de leur évolution durant différents chargements nécessite de représenter le mieux possible les différentes sources d'anisotropie plastique présentes à différentes échelles. Tout d'abord à l'échelle mésoscopique avec le mécanisme de glissement plastique cristallographique et par conséquent le développement de texture et de contraintes internes d'ordre 2. Puis à l'échelle microscopique où l'hétérogénéité intragranulaire induite se traduit par le développement d'une sous-structure de dislocations caractéristique du chargement appliqué. Dans cet article, nous chercherons à montrer l'importance de l'impact de la microstructure intragranulaire sur l'anisotropie du comportement lors de trajets complexes. Pour cela, nous présenterons d'abord la modélisation du comportement monocristallin ainsi que l'introduction de la description de l'évolution de la microstructure intragranulaire. Puis le lien avec le comportement du polycristal sera établi à l'aide d'une méthode autocohérente de transition d'échelles. Enfin, des surfaces de charge seront simulées et l'apport de la prise en compte de la microstructure intragranulaire sera montré.

2 Modélisation micromécanique du comportement élastoplastique

2.1 Echelle mésoscopique : loi de comportement monocristalline en grandes déformations

La modélisation mésoscopique, couplée à une méthode autocohérente de transition d'échelle (qui sera explicitée dans la 3^{ème} partie) définit le premier modèle utilisé. La loi de comportement élastoplastique monocristalline présentée ici s'appuie sur des travaux antérieurs menés notamment par Asaro (1983) ou Iwakuma et al. (1983). Elle a été récemment développée par Lorrain et al. (2005) en adoptant une formulation en transformations finies. La déformation plastique est uniquement due au glissement cristallographique. Les matériaux étudiés présentent un réseau cristallin cubique centré, les systèmes de glissement seront donc de la forme $\langle 111 \rangle \{110\}$ et $\langle 111 \rangle \{112\}$.

Le gradient de la vitesse, noté g , se décompose en une partie symétrique d correspondant au taux de déformation du réseau cristallin, et une partie antisymétrique w représentant le taux de rotation :

$$g_{ij} = d_{ij} + w_{ij} \quad (1)$$

Les parties plastiques du taux de déformation et de rotation peuvent être exprimées en introduisant la vitesse de glissement $\dot{\gamma}$:

$$d_{ij}^p = d_{ij} - d_{ij}^e = R_{ij}^g \dot{\gamma}^g, \quad w_{ij}^p = w_{ij} - w_{ij}^e = S_{ij}^g \dot{\gamma}^g \quad (2)$$

où R et S sont les parties symétrique et antisymétrique du tenseur de Schmid.

Un système sera actif si la valeur de sa cission résolue τ^g atteint une valeur critique τ_c^g et si son taux $\dot{\tau}^g$ atteint la valeur du taux de la cission critique $\dot{\tau}_c^g$. La vitesse de glissement du système considéré sera alors non nulle. Ce qui peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \tau^g < \tau_c^g &\Rightarrow \dot{\gamma}^g = 0 \\ \tau^g = \tau_c^g, \dot{\tau}^g < \dot{\tau}_c^g &\Rightarrow \dot{\gamma}^g = 0 \\ \tau^g = \tau_c^g, \dot{\tau}^g = \dot{\tau}_c^g &\Rightarrow \dot{\gamma}^g \neq 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Afin d'éviter une analyse combinatoire coûteuse en temps, la relation (3) peut être remplacée par une formulation régularisée inspirée de la viscoplasticité mais ne traduisant pas la dépendance au temps. Cette nouvelle formulation s'écrit :

$$\dot{\gamma}^g = k^g \dot{\tau}^g, \quad k^g = \frac{1}{H^{gg}} \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(k_1 \left(\frac{|\tau^g|}{\tau_c^g} - 1 \right) \right) \right) \right\} \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + \tanh(k_2 \dot{\tau}^g \tau^g) \right) \right\} \quad (4)$$

où H^{gg} est le terme d'auto-écrouissage.

La loi d'élasticité en grandes déformations s'écrit sous la forme :

$$\hat{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} (d_{kl} - d_{kl}^p) - \sigma_{ij} d_{kk} \quad (5)$$

où C est le tenseur d'élasticité et $\hat{\sigma}$ la dérivée corotationnelle de la contrainte de Cauchy. Après quelques développements mathématiques, l'expression de la vitesse de glissement s'écrit :

$$\dot{\gamma}^g = (\delta_{hg} + k^h R_{ij}^h C_{ijkl} R_{kl}^g)^{-1} k^h R_{ij}^h (C_{ijkl} - \sigma_{ij} \delta_{kl}) d_{kl} \quad (6)$$

où δ est le symbole de Kronecker.

La loi de comportement incrémentale du monocristal est décrite en utilisant un opérateur tangent reliant le taux de contrainte nominale \dot{n} au gradient de la vitesse g :

$$\dot{n}_{ij} = l_{ijkl} g_{kl}, \quad l_{ijkl} = \left[C_{ijkl} - \frac{1}{2} (\delta_{ik} \sigma_{lj} + \delta_{il} \sigma_{kj}) - \frac{1}{2} (\sigma_{ik} \delta_{lj} - \sigma_{il} \delta_{jk}) \right] - \left[C_{ijpq} R_{pq}^g + S_{ip}^g \sigma_{pj} - \sigma_{ip} S_{pj}^g \right] \left[\delta_{hg} + k^h R_{mn}^h C_{mnpq} R_{pq}^g \right]^{-1} k^h R_{mn}^h [C_{mnkl} - \sigma_{nm} \delta_{kl}] \quad (7)$$

2.2 Echelle microscopique : modélisation des mécanismes intragranulaires

Afin d'obtenir le second modèle permettant de montrer l'apport de la prise en compte de la microstructure, une modélisation à l'échelle intragranulaire, s'inspirant des travaux de Peeters (2002), est introduite avant de réaliser l'étape de transition d'échelle. La description de la microstructure intragranulaire et de son évolution repose sur l'observation expérimentale de structures de dislocations particulières présentes dans des grains dont la structure cristalline est cubique centrée.

Au cours de la déformation plastique, une microstructure intragranulaire se développe, composée de murs de dislocations et de cellules de dislocations orientées de manière irrégulière. Trois densités de dislocations sont nécessaires pour définir cette microstructure (Figure 1). Les cellules de dislocations sont représentées par une densité de dislocations ρ unique pour l'ensemble des systèmes de glissement. Deux types de densité de dislocations sont associés aux six familles de murs possibles : la densité des dislocations immobiles ρ^{wd} stockées dans les murs et la densité des dislocations polaires ρ^{wp} , dont la particularité est de posséder un signe.

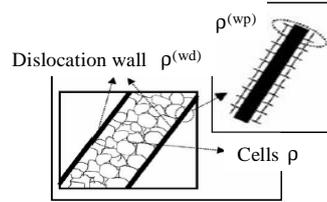


FIG. 1. Représentation de la microstructure intragranulaire – Peeters (2002)

En accord avec différentes observations expérimentales, le modèle construit au maximum, à chaque pas de calcul, deux familles de murs de dislocations parallèles aux plans $\{110\}$ dont les activités de glissement sont les deux plus prédominantes. Les autres familles correspondent aux murs générés précédemment, permettant ainsi de prendre en compte l'effet de la microstructure existante et donc l'histoire des chargements que subit le matériau.

L'évolution de la densité de dislocations immobiles de chaque famille i de murs au pas actuel est définie par :

$$\dot{\rho}_i^{wd} = \frac{1}{b} \left(I^{wd} \sqrt{\rho_i^{wd}} - R^{wd} \rho_i^{wd} \right) \dot{\Gamma}_i \quad (8)$$

avec b la norme du vecteur de Burgers, $\dot{\Gamma}_i$ la vitesse de glissement totale associée au $i^{\text{ème}}$ mur de dislocations, I^{wd} et R^{wd} les coefficients d'immobilisation et de restauration.

Le stockage et l'annihilation des dislocations polaires de chaque famille i de murs au pas actuel sont décrits par :

$$\dot{\rho}_i^{wp} = \left(\text{sign}(\Phi_i^{wp}) I^{wp} \sqrt{\rho_i^{wd} + |\rho_i^{wp}|} - R^{wp} \rho_i^{wp} \right) |\Phi_i^{wp}| \quad (9)$$

où $\Phi_i^{wp} = \sum_{s=1}^n \frac{\dot{\gamma}^s}{b} m^s n_i^w$ est le flux de dislocations des systèmes de glissement non coplanaires à chaque famille i de murs de dislocations générés au pas actuel, le produit scalaire du vecteur

unitaire de la direction de glissement m^s du système s avec la normale unitaire n_i^w au mur i étant nul pour une activité de glissement coplanaire avec cette famille de murs. I^{wp} et R^{wp} sont respectivement les coefficients d'immobilisation et de restauration des dislocations polaires.

Lorsque le flux Φ_i^{wp} associé au mur actuel est inversé, ce qui est le cas notamment lors d'un essai Bauschinger, les dislocations polarisées amassées le long de ces murs peuvent facilement se remettre en mouvement et être annihilées, ce qui peut se traduire par l'équation suivante :

$$\dot{\rho}_i^{wp} = -R_{rev}\rho_i^{wp} \left| \Phi_i^{wp} \right| \quad (10)$$

où R_{rev} correspond à la vitesse d'annihilation des dislocations mobiles responsables de la polarité des murs par l'inversion du flux.

Un changement de trajet de déformation ou une rotation du monocristal peut engendrer l'activation de nouveaux systèmes de glissement. Ces dislocations mobiles vont alors générer de nouveaux murs de dislocations correspondant au mode actuel de déformation et détruire les murs formés lors de la déformation précédente. L'évolution des densités de dislocations immobiles et polaires pour les anciens murs est décrite par :

$$\dot{\rho}_i^{wd} = -\frac{R_{ncg}}{b}\rho_i^{wd}\dot{\Gamma}_{new}, \quad \dot{\rho}_i^{wp} = -\frac{R_{ncg}}{b}\rho_i^{wp}\dot{\Gamma}_{new} \quad (11)$$

où $\dot{\Gamma}_{new}$ est la vitesse de glissement totale dans les deux plans cristallographiques ayant la plus grande activité de glissement et R_{ncg} est le coefficient d'annihilation des murs latents.

Durant un essai Bauschinger, la plupart des systèmes de glissement actifs lors de la pré-déformation le reste durant le second trajet, mais dans le sens opposé. Les dislocations polaires amassées le long des murs peuvent facilement se mouvoir et être annihilées par les dislocations de signe opposé dans les cellules, engendrant une augmentation de la vitesse d'annihilation des cellules de dislocations :

$$\dot{\rho} = \frac{1}{b} \left\langle \left(I\sqrt{\rho} - R\rho \right) \sum_{s=1}^n |\dot{\gamma}_s| - \Psi R_2 \rho \frac{\rho_{bausch}}{2\rho_{sat}^{wp}} \sum_{s=1}^n |\dot{\gamma}_s| \right\rangle \quad (12)$$

où I and R sont les coefficients d'immobilisation et d'annihilation associés aux cellules de dislocations. Si aucun flux n'est inversé $\Psi = 0$, sinon $\Psi = 1$ avec $\rho_{bausch} = \left| \rho_i^{wp} \right|$ si le flux de la famille i de murs est inversé, et $\rho_{bausch} = \sum_{i=1}^2 \left| \rho_i^{wp} \right|$ si les deux flux sont inversés.

L'expression de la cission critique du système de glissement g tient compte de plusieurs contributions : τ_0 représente tous les aspects de la microstructure n'entrant pas en jeu dans les variables internes (i.e. taille de grain initiale, etc.), τ^{cells} traduit l'érouissage isotrope dû aux cellules alors que τ^w exprime à la fois l'érouissage latent et la polarité des murs :

$$\tau_c^g = \tau_0 + (1-f)\tau^{cells} + f \sum_{i=1}^6 \tau_{ig}^w \quad (13)$$

avec

$$\tau^{cells} = \alpha Gb\sqrt{\rho}, \quad \tau_{ig}^w = \alpha Gb \left(\left\langle m_s \cdot n_i^w \text{sign}(\rho_i^{wp}) \sqrt{\left| \rho_i^{wp} \right|} \right\rangle + \left| m_s \cdot n_i^w \right| \sqrt{\rho_i^{wd}} \right) \quad (14)$$

où α est un paramètre d'interaction, G le module de cisaillement et f la fraction volumique des murs.

3 Transition d'échelle : modèle autocohérent

Afin de déduire le comportement macroscopique $\dot{N} = L : G$ du polycristal à partir du comportement de l'ensemble des grains, le modèle autocohérent au sens de Hill est utilisé. Les principales équations de cette approche classique sont présentées ici, tous les détails étant disponibles dans la thèse de Lorrain (2005).

Les grandeurs macroscopiques sont les moyennes volumiques des grandeurs microscopiques en termes de gradient de vitesse et de taux de contrainte nominale :

$$G = \frac{1}{V} \int_V g dV, \quad \dot{N} = \frac{1}{V} \int_V \dot{n} dV \quad (15)$$

Le lien existant entre les grandeurs locales et macroscopiques est réalisé grâce à deux tenseurs de localisation A et B d'ordre 4, dépendant de la position du point x du Volume Élémentaire Représentatif (VER) :

$$g(x) = A(x) : G, \quad \dot{n}(x) = B(x) : \dot{N} \quad (16)$$

La combinaison des lois de comportement locale et globale avec (15) et (16) permet d'obtenir l'expression du module tangent macroscopique L :

$$L = \overline{l(x) : A(x)} \quad (17)$$

Le polycristal est supposé être composé de grains ellipsoïdaux orientés différemment. Le comportement et les champs mécaniques sont supposés constants pour chaque grain. Une fonction indicatrice θ^I pour chaque grain I ayant un volume V^I est définie par :

$$\begin{cases} \theta^I(x) = 1 & \text{if } x \in V^I \\ \theta^I(x) = 0 & \text{if } x \notin V^I \end{cases} \quad (18)$$

Alors :

$$g(x) = \sum_{I=1}^{N_{gran}} g^I \theta^I(x), \quad l(x) = \sum_{I=1}^{N_{gran}} l^I \theta^I(x) \quad (19)$$

où g^I (resp. l^I) est la moyenne volumique du gradient de vitesse (resp. module tangent) du grain I et N_{gran} est le nombre de grains constituant l'agrégat.

En introduisant le tenseur de Green, le tenseur de concentration A^I pour le grain I est donné par :

$$A^I = (I - T^{II} : (l^I - L))^{-1} : \overline{(I - T^{II} : (l^I - L))^{-1}} \quad (20)$$

où T^{II} est le tenseur d'interaction du grain I , associé au tenseur d'Eshelby pour une inhomogénéité ellipsoïdale. Pour un agrégat polycristallin composé de N_{gran} grains ayant une fraction volumique respective f^I , l'expression de l'autocohérent à un site peut être obtenu :

$$L = \sum_{I=1}^{N_{gran}} f^I l^I : A^I \quad (21)$$

4 Résultats

Les surfaces de charge sont obtenues pour un acier ferritique. Elles sont tracées à iso-dissipation dont la valeur est calée à partir de la traction uniaxiale pour une éprouvette orientée dans la direction de laminage. On relève pour chaque essai le couple σ_{11} , σ_{22} correspondant à la

déformation ε_{essai} qui permet d'atteindre la dissipation $D = \int_0^{\varepsilon_0} \sigma : d\varepsilon^p$ calculée dans le cas de la traction uniaxiale, pour une déformation plastique ε_0 :

$$\int_0^{\varepsilon_{essai}} \sigma : d\varepsilon^p = D \quad (22)$$

La figure 1 présente les surfaces de charge obtenues à 0,2% et 2% de déformation plastique à l'aide des deux modèles présentés précédemment. L'impact de la microstructure intragranulaire semble s'intensifier avec le niveau de déformation, ce qui est compréhensible puisque la microstructure se développe avec la déformation.

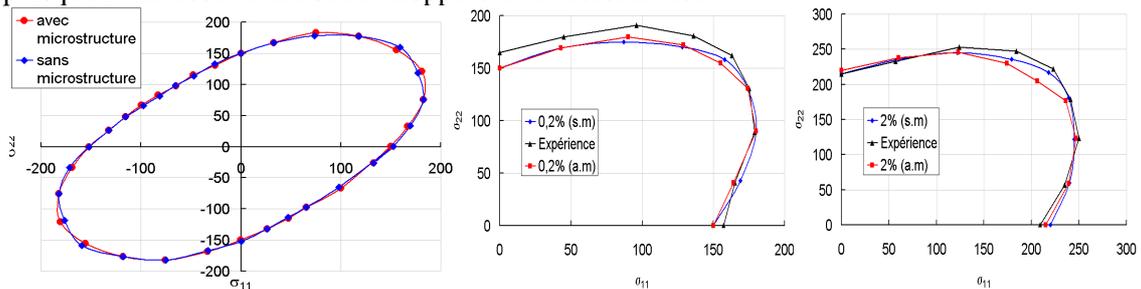


FIG. 1 – Surfaces de charge lors de chargements monotones.

5 Conclusions

Les deux modélisations choisies pour montrer l'influence de la microstructure intragranulaire sur les surfaces de charge ont été développés en détails. La première modélisation permet de décrire le comportement monocristallin à l'aide de la modélisation mésoscopique, le comportement macroscopique étant obtenu à l'aide d'un schéma autocohérent de transition d'échelle. La seconde modélisation utilisée consiste à ajouter au premier modèle une description microscopique des mécanismes intragranulaires. Les surfaces de charge obtenues à l'aide de ces deux modèles, pour des trajets monotones, sont similaires, il semblerait donc que la microstructure intragranulaire à peu (voire pas) d'influence sur ce type de trajets pour ce niveau de déformation (0,2% de déformation plastique). En revanche, nous mettrons en évidence ultérieurement, les calculs étant encore en cours, que la microstructure est à prendre en compte lors de trajets complexes afin de décrire correctement les surfaces de charge.

Références

- Asaro, R.J. 1983 Crystal plasticity. *Journal of Applied Mechanics* **50**, 921-934
- Iwakuma, T. & Nemat-Nasser, S. 1983 Finite elastic-plastic deformation of polycrystalline metals and composites. Technical report 83-3-51
- Lorrain, J.P., Ben Zineb, T., Abed-Meraim, F. & Berveiller, M. 2005 Ductility loss modelling for BCC single crystals. *International Journal of Forming Process* **8-2**, 135-158
- Lorrain, J.P. 2005 Critère de ductilité basé sur la perte d'ellipticité du module tangent élastoplastique déduit d'un modèle autocohérent. Ph.D. Thesis, ENSAM Metz
- Peeters, B. 2002 Multiscale modelling of the induced plastic anisotropy in IF steel during sheet forming. Ph.D. Thesis, Katholieke Universiteit Leuven