



Approche non locale en plasticité cristalline. Application à la fatigue oligocyclique d'un acier 316 LN

Olivier FANDEUR (CEA Saclay) & Colette REY (ECP)

Présentation de travaux issus de la thèse de
Julien Schwartz, soutenue en juin 2011 et réalisée
dans le cadre du Projet ANR AFGRAP

Contexte scientifique

Les modèles de plasticité cristalline « classiques » sont mis à défaut lorsqu'il s'agit de décrire :

- les effets d'échelle (effets de taille de grains) sur les champs mécaniques locaux
- le développement de différentes structures de dislocations

Objectif :

Étendre les approches locales de plasticité cristalline avec la prise en compte d'effets d'échelle par l'intermédiaire des Dislocations Géométriquement Nécessaires (GND)

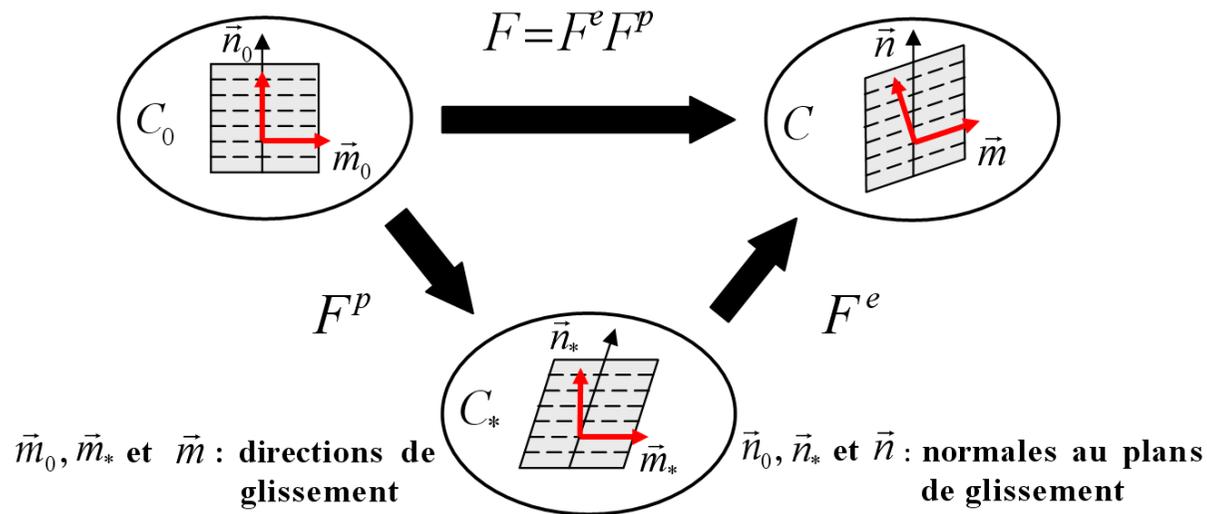
Application :

Décrire la fatigue oligocyclique à partir d'essais de traction simple



LES MODÈLES DE PLASTICITÉ CRISTALLINE

Transformations finies (Asaro 83, Pierce 84)



$$\begin{aligned} \tilde{D}^e &= \dot{\tilde{\epsilon}}^e \\ \tilde{D}^p &= \sum_s \dot{\gamma}^s (\vec{m}^s \otimes \vec{n}^s)_S \\ \tilde{W}^e &= \dot{\tilde{R}}^e \tilde{R}^{e-1} \\ \tilde{W}^p &= \sum_s \dot{\gamma}^s (\vec{m}^s \otimes \vec{n}^s)_{AS} \end{aligned}$$

Evolution avec la transformation élastique des vecteurs caractéristiques du glissement plastique

$$\vec{m}^s = \tilde{F}^e \cdot \vec{m}_0^s \quad \vec{n}^s = \tilde{F}^{e-1} \cdot \vec{n}_0^s$$

Dérivée de Jaumann des contraintes de Cauchy

$$\hat{\tilde{\sigma}} = \dot{\tilde{\sigma}} - \tilde{W}^e \cdot \tilde{\sigma} + \tilde{\sigma} \cdot \tilde{W}^e$$

Loi d'élasticité

$$\hat{\tilde{\sigma}} = \tilde{\tilde{C}}^e : \tilde{D}^e$$

$$\dot{\tilde{\sigma}} = \tilde{\tilde{C}}^e : \tilde{D}^e + \tilde{W} \cdot \tilde{\sigma} - \tilde{\sigma} \cdot \tilde{W} - \sum_s \dot{\gamma}^s \tilde{R}^s \longrightarrow$$

Cission réduite sur les systèmes de glissement

$$\dot{\tilde{R}}^e = \tilde{R}^e \cdot \left(\tilde{W} - \sum_s \tilde{W}^s \right) \quad \tilde{R}^s = \tilde{\tilde{C}}^e : \tilde{D}^s + \tilde{W}^s \cdot \tilde{\sigma} - \tilde{\sigma} \cdot \tilde{W}^s$$

Modèle de plasticité cristalline Local (CristalECP_Loc)

Comportement du grain = comportement du monocristal

Implémentation des lois classiques de la plasticité cristalline
(Kocks, Kubin, Rauch, Estrin, Tabourot...)

Critère de Schmid $\boxed{|\tau^s| \geq \tau_c^s}$

Cission critique $\boxed{\tau_c^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_t a^{st} \rho^t}}$

Loi viscoplastique

$$\frac{\dot{\gamma}^s}{\dot{\gamma}_0} = \left| \frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right|^n \text{sgn}(\tau^s), \text{ si } |\tau^s| \geq \tau_c^s$$
$$\dot{\gamma}^s = 0, \text{ si } |\tau^s| < \tau_c^s$$

Évolution de la densité de dislocations sur le système (s)

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

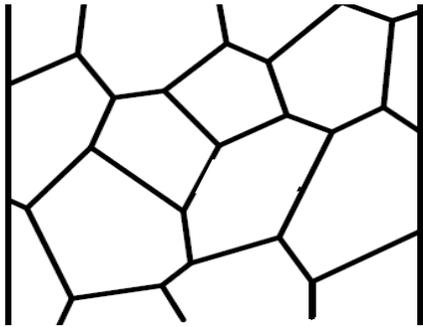
Variables internes : **densité de dislocations sur les systèmes de glissement**

À l'échelle du polycristal, modèle permettant la description de :

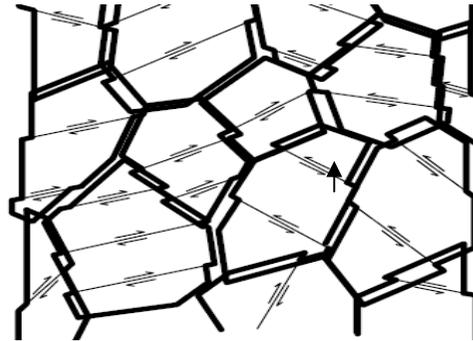
- **Ecrouissage anisotrope**
- **Faible écrouissage cinématique**

Dislocations géométriquement nécessaires (GND)

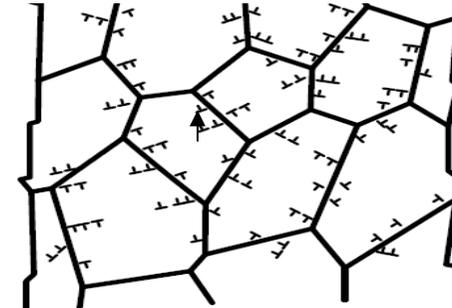
Incompatibilité à l'échelle du polycristal : *Nye* , *Kröner*, modèle d'*Ashby* 1970



Polycristal



Glissements selon la loi de Schmid → génèrent des recouvrements et des vides

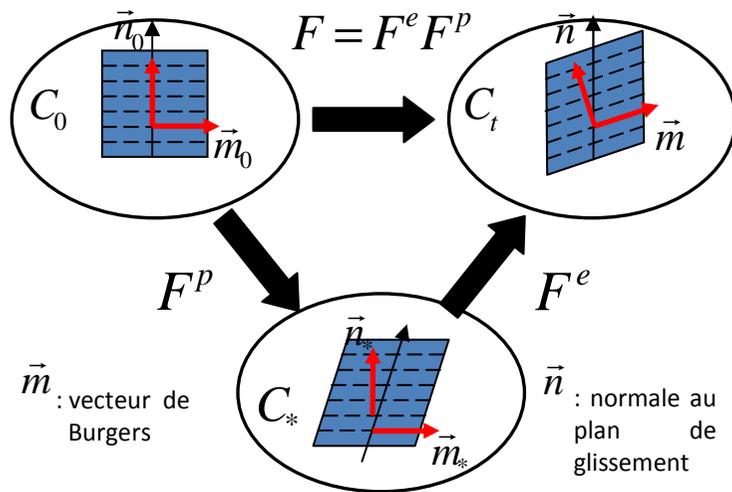


Dislocations Géométriquement Nécessaires → restaurent la compatibilité

Théorie (*Nye* 1953, *Kröner* 1959) : Les GND sont liées au gradient spatial de la déformation et restaurent la compatibilité de la déformation lorsqu'il y a discontinuité du réseau cristallin. Intégrées dans les lois cristallines, elles font apparaître **une nouvelle longueur interne**.

Modèle de plasticité cristalline Non Local (CristalECP_NLoc)

Modèle Non local s'appuyant sur les travaux de Gurtin, Acharya, Bassani, Meissonier



Vecteur de Burgers des nouvelles dislocations :

$$\vec{b}^e = \oint_{\partial s} \overline{\overline{F^{e-1}}} d\vec{x} = \iint_s \left(\text{rot } \overline{\overline{F^{e-1}}} \right) \vec{r} ds$$

Tenseur densité de dislocations :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \text{rot } \underline{\underline{F}}^e \approx \text{rot } \underline{\underline{R}}^e$$

Densité de dislocations moyenne sur le système (s) :
(travaux de Acharya et al.)

$$\alpha^s = \sqrt{(\underline{\underline{\alpha}} \cdot \vec{n}^s) \cdot (\underline{\underline{\alpha}} \cdot \vec{n}^s)}$$

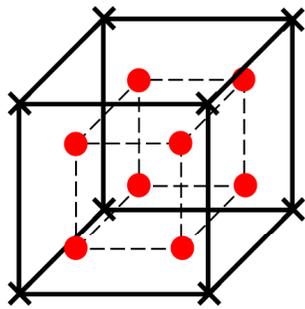
$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(k_0 \alpha^s + \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - 2 y_c \rho^s \right)$$

k_0 paramètre à identifier

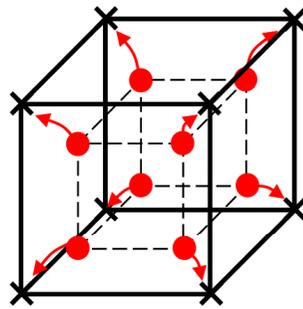
Modèle de plasticité cristalline Non Local (CristalECP_NLoc)

Principe de l'implémentation du terme non local
(codes EF AbaqusTM et Cast3mTM)

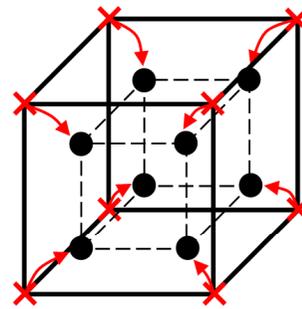
Comment calculer un gradient de rotation élastique?



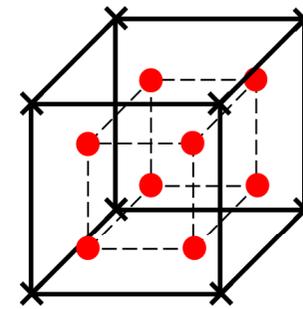
À la fin d'un pas de temps : \bar{R} aux points d'intégration



Étape 1 : extrapolation de \bar{R} aux noeuds



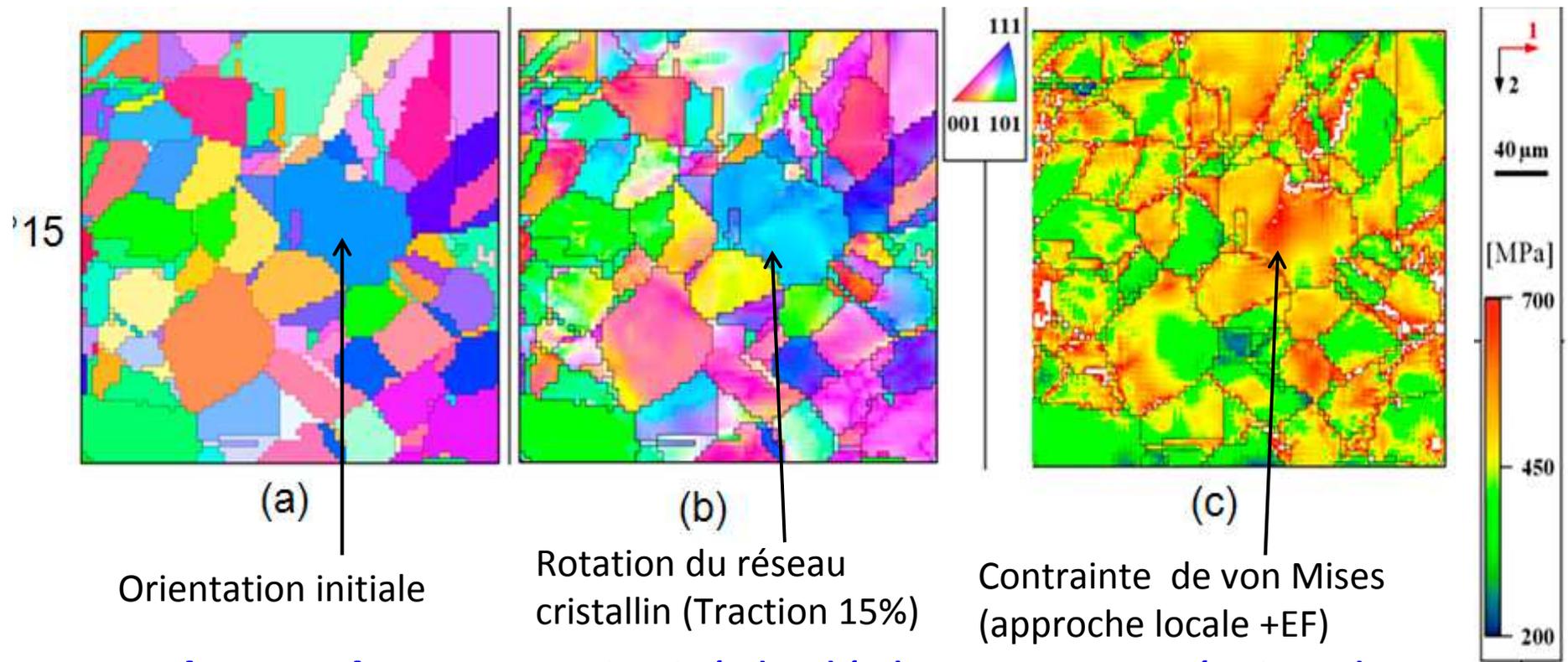
Étape 2 : calcul de $\bar{\alpha}$ aux points d'intégration



Étape 3 : projection de $\bar{\alpha}$ sur chaque système de glissement

Les gradients sont calculés dans chaque élément de manière explicite (en début de pas de temps et constant sur le pas)

Résumé des approches locale et non locales et EF



Approche Locale+EF : continuité du déplacement + création de gradients de rotation, déformation, contrainte

Approche Non Locale : prise en compte des incompatibilités dues aux gradients de rotation de réseau et de déformation élastique ou de rotation plastique et de déformation plastique



IDENTIFICATION DES PARAMÈTRES DU MODÈLE

Au minimum deux essais mécaniques: l'un pour l'identification, l'autre pour la simulation

Trouver les bonnes conditions aux limites représentant l'agrégat dans le polycristal

Un Volume (Elémentaire) Représentatif

Identification des paramètres des modèles

Paramètres des modèles Cristal_ECP_Loc et Cristal_ECP_NLoc :

Paramètres élastiques			Paramètres viscoplastiques								Paramètre non local
C^e_{11}	C^e_{12}	C^e_{44}	α^{su}	τ_0	b	ρ^s_0	K	y_c	γ'_0	n	k_0
[GPa]	[GPa]	[GPa]	[-]	[MPa]	[m]	[m ⁻²]	[-]	[m]	[s ⁻¹]	[-]	[-]

$$\underline{\underline{\sigma}}^e = \underline{\underline{C}}^e \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}^e$$

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_t a^{st} \rho^t}$$

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

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(k_0 \alpha^s + \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - 2 y_c \rho^s \right)$$

➤ Données bibliographiques :

Constantes élastiques (isotrope ou anisotrope)

Vecteur de Burgers (Robertson *et al.* 2001)

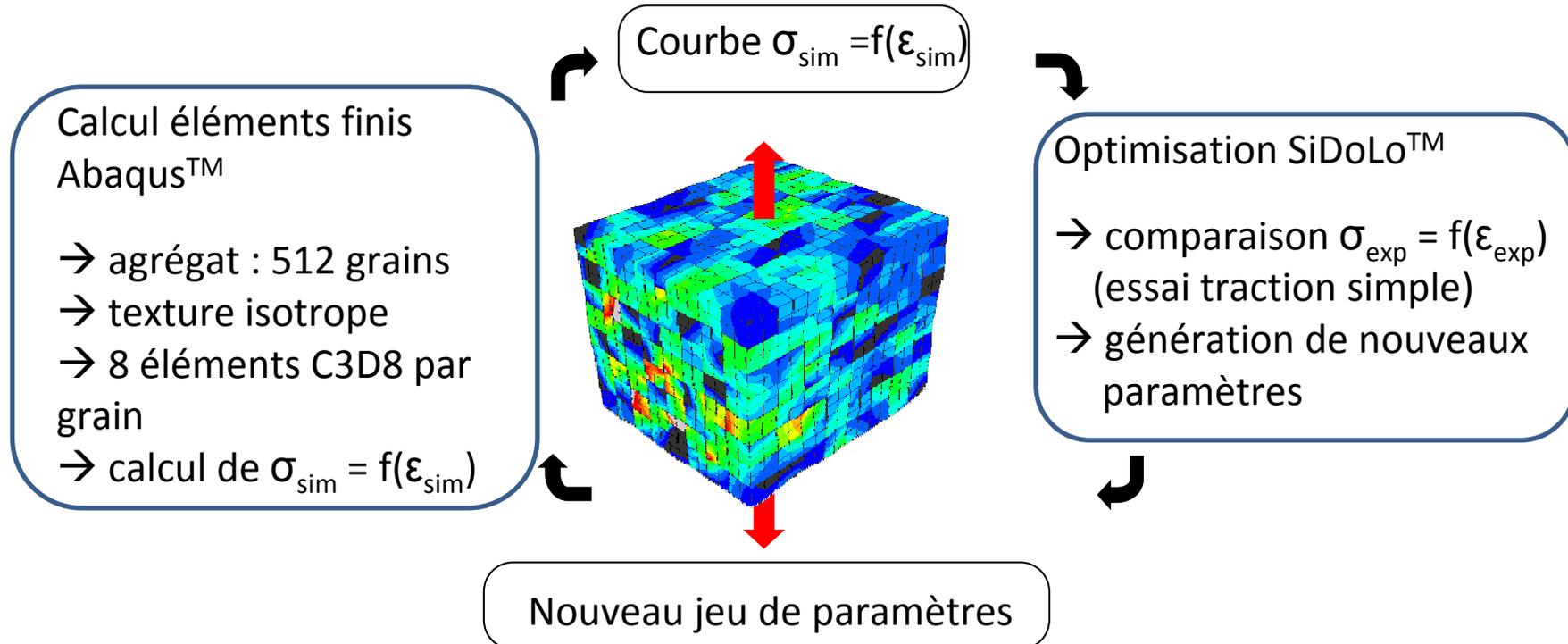
Matrice d'interaction des dislocations a^{su} (Franciosi 1983, Devincere 2008)

➤ Observations microstructurales : densité de dislocations initiale ρ^s_0 (MET)

➤ Essais macroscopiques de traction simple (à différentes vitesses)

Identification des paramètres du modèle

Interface SiDoLo™/Abaqus™ (Libert 2007, Cédart 2008)



→ **Cristal_ECP_Loc** : un essai de traction simple $\sigma_{exp} = f(\epsilon_{exp})$ ($D = 27 \mu m$)

→ **Cristal_ECP_NLoc** : trois essais de traction simple $\sigma_{exp} = f(\epsilon_{exp})$ ($D = 27, 17, 13 \mu m$)

Quelles conditions aux limites sur l'agrégat?

Validation sur courbes macroscopiques en fatigue

Modèle Local - Identification sur essai de traction 3.10^{-3} s^{-1}

Constantes Élastiques

Constantes élastiques	C_{e11} (GPa)	C_{e12} (GPa)	C_{e44} (GPa)
Cas isotrope Eiso (Schwartz, 2011)	244	96	74
Cas anisotrope Eani (Huntington, 1958)	198	125	122

Matrice d'interaction des dislocations (littérature)

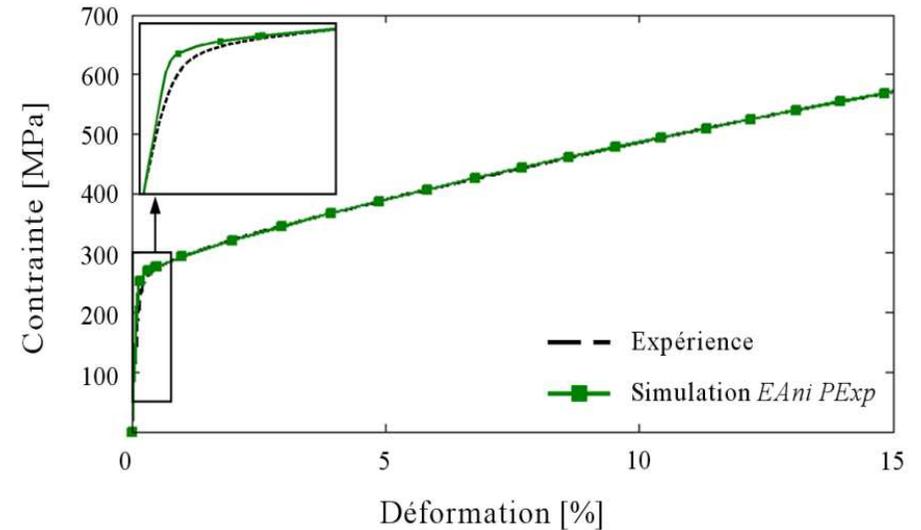
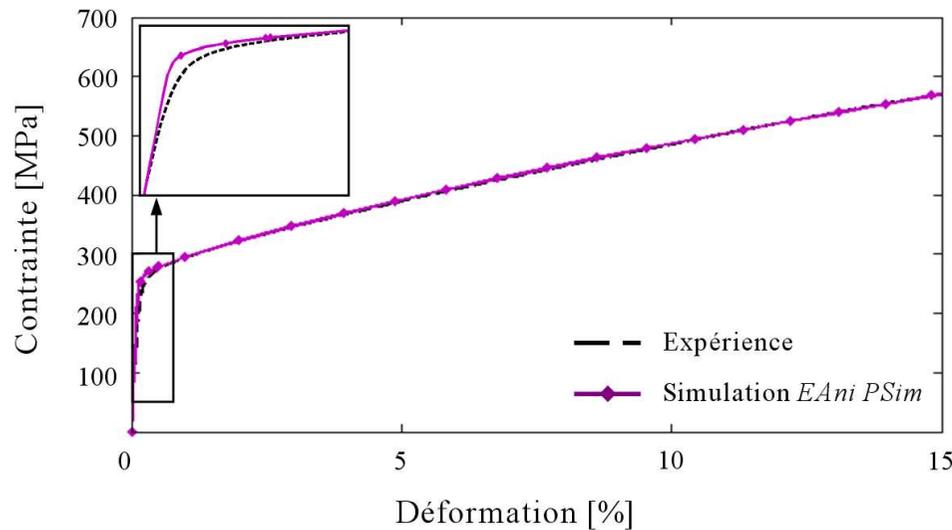
	a_0^{aut}	a_1^{col}	a_1^{cop}	a_1^{ort}	a_2^{glis}	a_3^{ses}
PExp (Franciosi)	0.02	0.08	0.08	0.08	0.18	0.30
PSim (Devincre)	0.1236	0.6330	0.1236	0.0709	0.1388	0.1236

Littérature + Mesures

Identification

	b (m)	ρ_0^s (m ⁻²)	$\dot{\gamma}_0$ (s ⁻¹)	n (-)	Tau0 (MPa)	K(-)	yc (m)
ElsoPExp	$2.54 \cdot 10^{-10}$	$1.77 \cdot 10^{-12}$	$4.00 \cdot 10^{-11}$	73.50	46.82	26.15	$2.08 \cdot 10^{-9}$
ElsoPsim	-	-	-	-	44.90	37.14	$1.33 \cdot 10^{-9}$
EAniPExp	-	-	-	-	25.46	42.00	$1.93 \cdot 10^{-9}$
EAniPSim	-	-	-	-	22.30	59.97	$1.29 \cdot 10^{-9}$
	Vecteur de Burgers	Densité initiale de dislocations	vitesse	1/sensibilité à la vitesse	Friction du réseau et autre	Libre parcours moyen	Distance d'annihilation

Modèle Local - Résultat de l'identification



Traction :

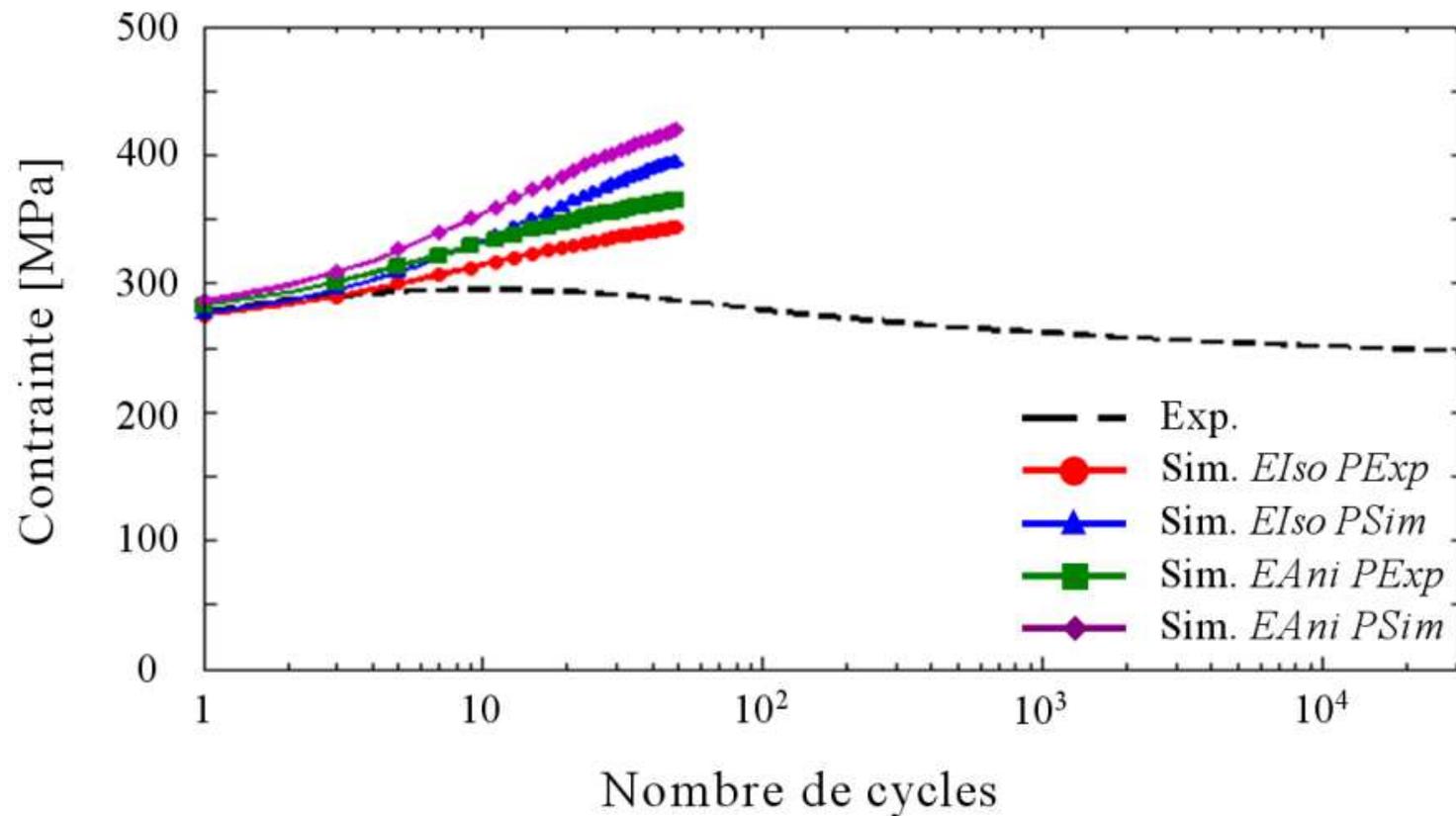
Les 4 jeux de paramètres donnent des résultats quasi-identiques

Dans tous les cas :

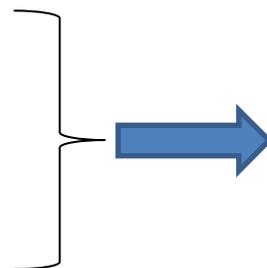
Léger désaccord dans le stade de microplasticité : $\epsilon < 1 \%$

Très bon accord pour $\epsilon > 1 \%$

Résultats de l'approche locale en fatigue



Fatigue
Pour $N > 5$ cycles,
très mauvais accord



Identifier K , γ_c pour les faibles
et les moyennes déformations ?
 \rightarrow Pas suffisant

Modèle Non Local - Identification

Nouvelle identification de τ_0 , K et y_c avec k_0

Fatigue oligocyclique :

Identification sur les courbes de traction pour $\epsilon < 1 \%$

Loi de Hall et Petch:

Identification sur les courbes de traction pour $\epsilon > 1 \%$

Rappel : Non Local = ajout d'un terme sur la loi d'évolution de la densité des dislocations

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(k_0 \alpha^s + \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - 2 y_c \rho^s \right)$$

Tenseur densité de dislocations

$$\bar{\alpha} = \overline{\text{rot } F^{e-1}} \approx \overline{\text{rot } R^e}$$

Moyenne proposée par Acharya et al

$$\alpha^s = \sqrt{(\bar{\alpha} \cdot \vec{n}^s) \cdot (\bar{\alpha} \cdot \vec{n}^s)}$$

Modèle Non Local - Identification

Identification du modèle Non Local réalisée sur les courbes de traction obtenues pour différentes tailles de grains

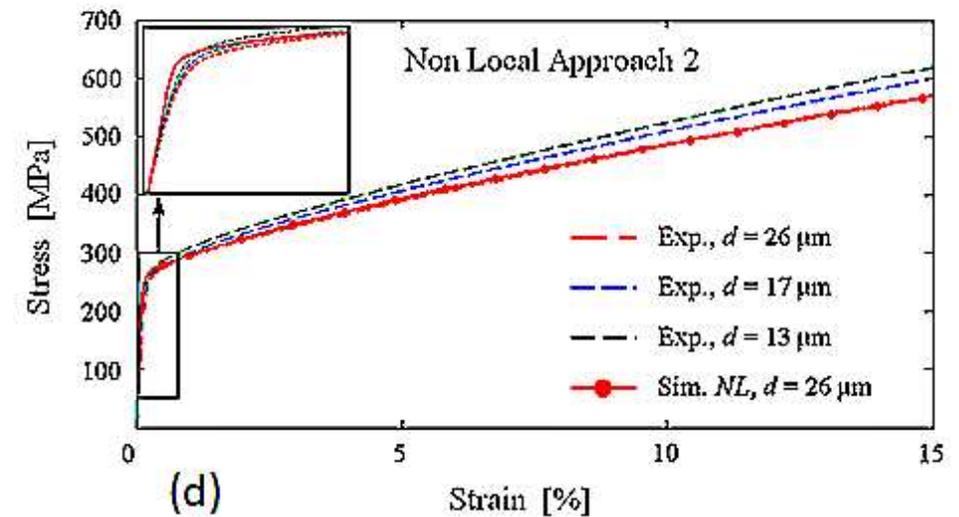
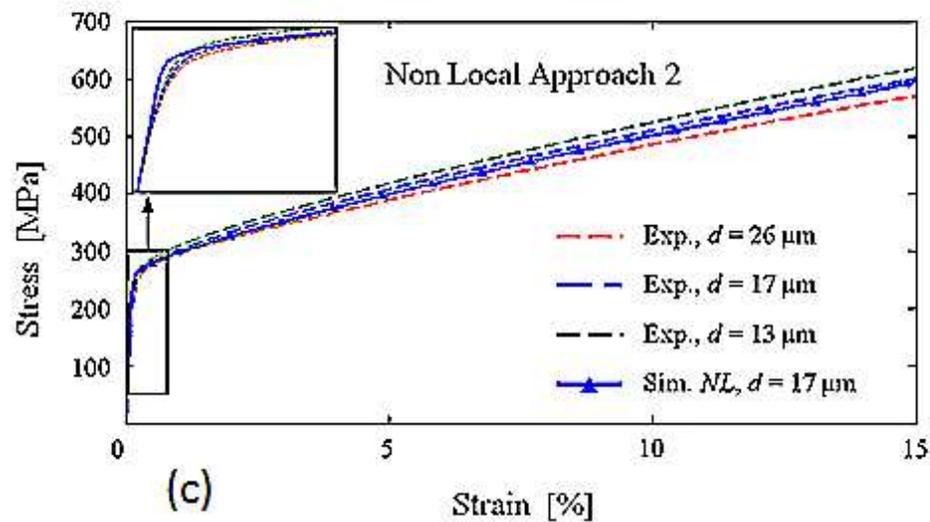
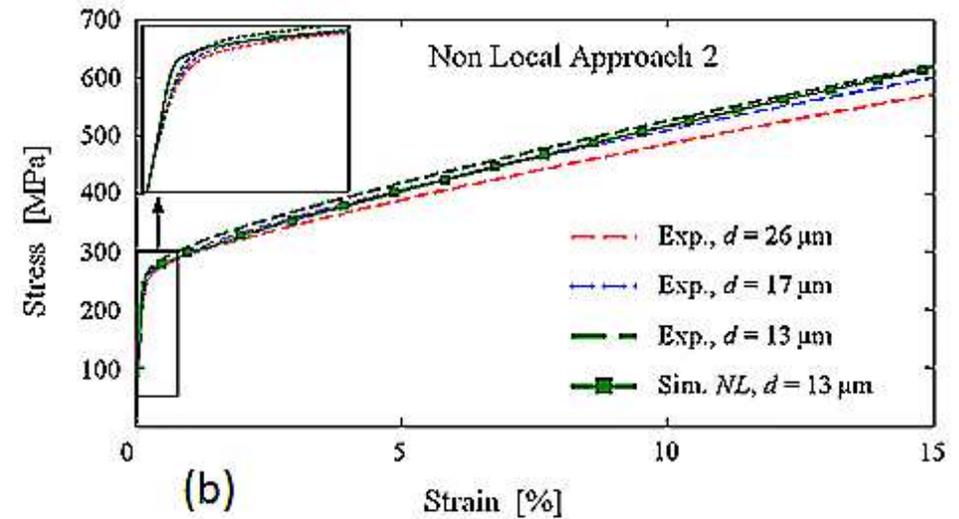
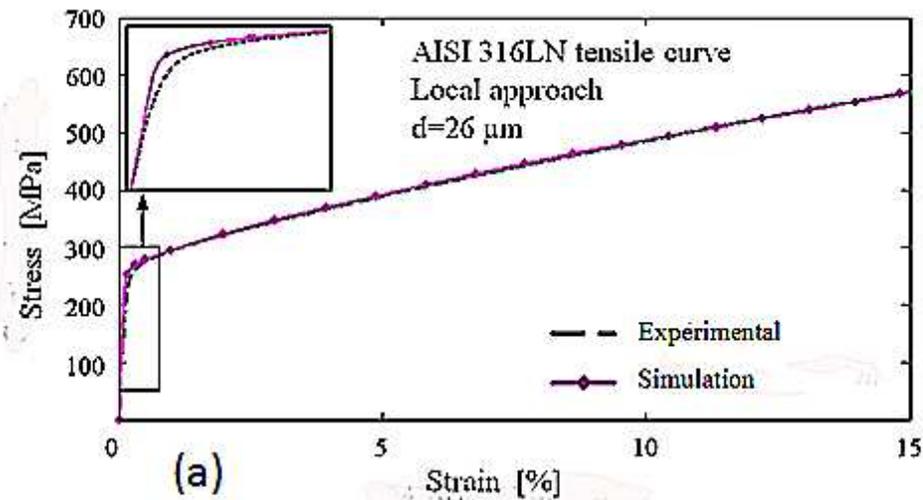
		Tau0 (MPa)	K (-)	y_c (m)	k_0 (-)
Traction $\epsilon > 1\%$	Local	22.30	59.97	$1.29 \cdot 10^{-9}$	0
Traction $\epsilon < 1\%$	Non Local	22.30	88.00	$9.14 \cdot 10^{-9}$	150
Traction $\epsilon > 1\%$	Non Local	22.30	47.00	$4.45 \cdot 10^{-9}$	8.25

Paramètres identifiés pour ($\epsilon < 1\%$) conduisent à un durcissement trop fort pour les grandes déformations ($> 2\%$)

On devrait faire dépendre K , k_0 (y_c) du taux de déformation et de la microstructure si on souhaite paramètres valables pour tout ϵ

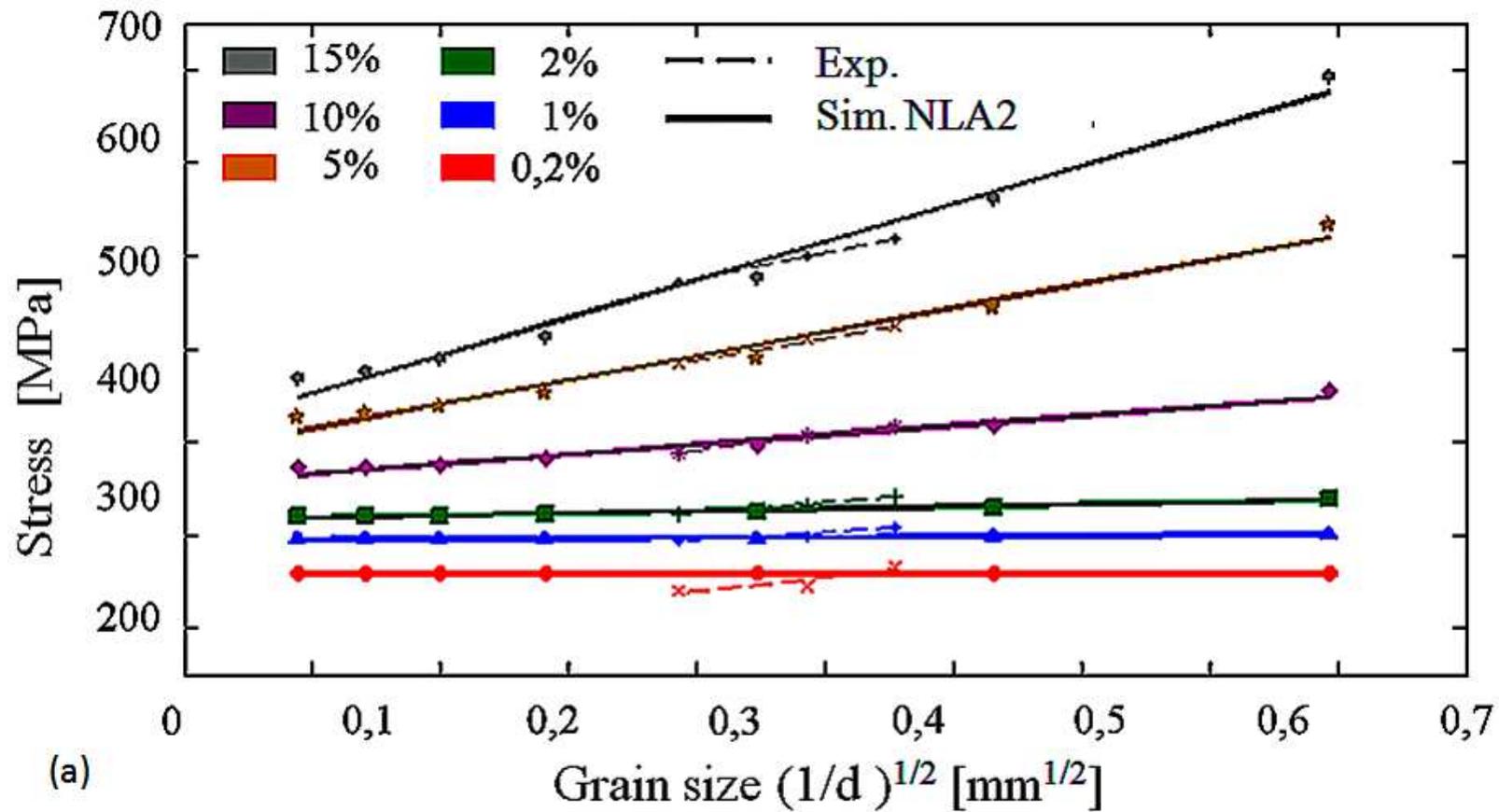
Traction simple : Comparaison des modèles Loc et NLoc

Identification pour $\epsilon > 1\%$



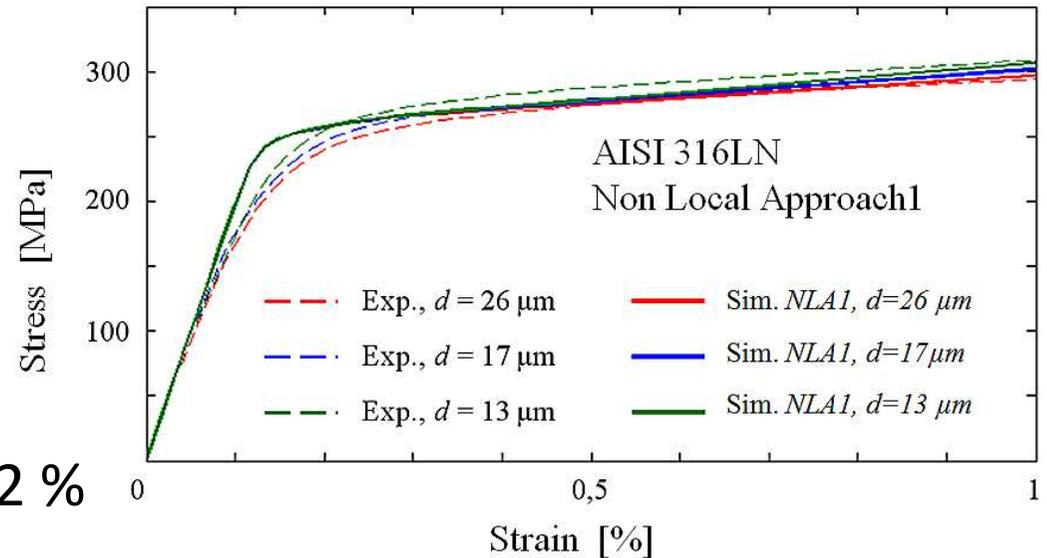
Traction simple : Validation du modèle NLoc

Courbe numérique de l'effet de taille de grains Identification pour $\epsilon > 1\%$

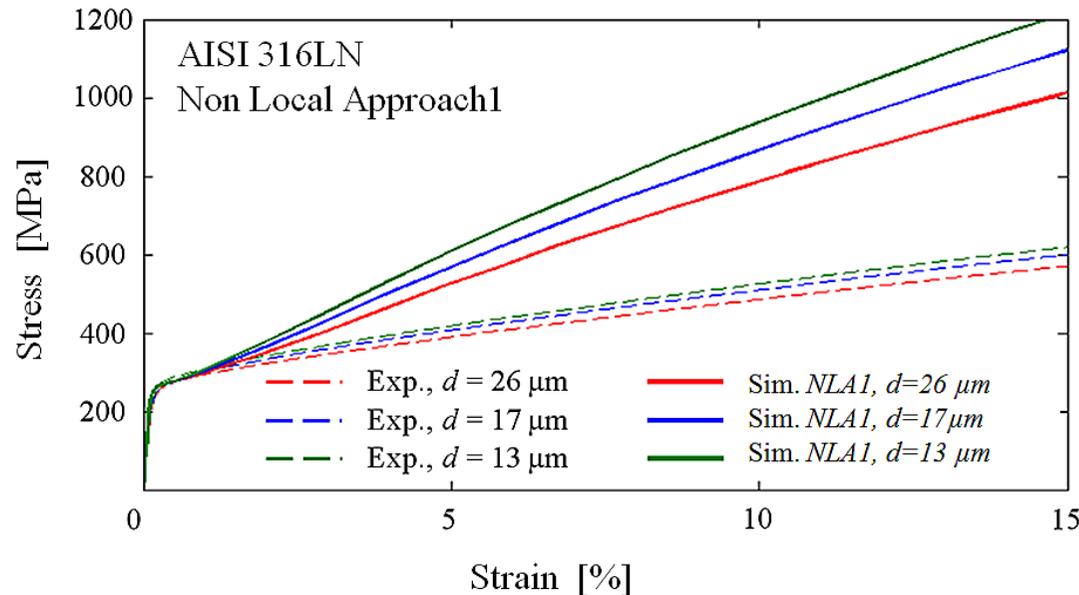


Traction simple : Comparaison des modèles Loc et NLoc

$\varepsilon < 1 \%$

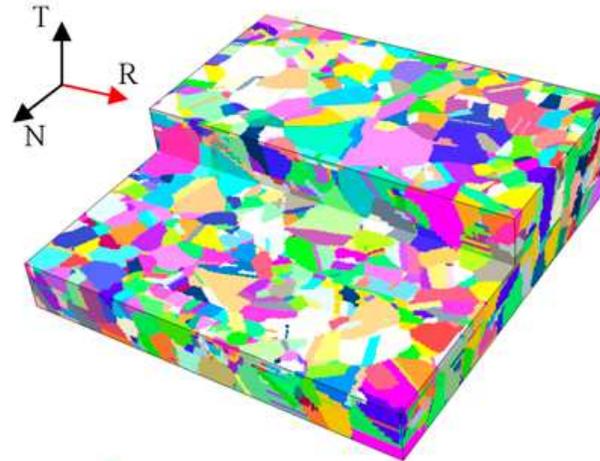
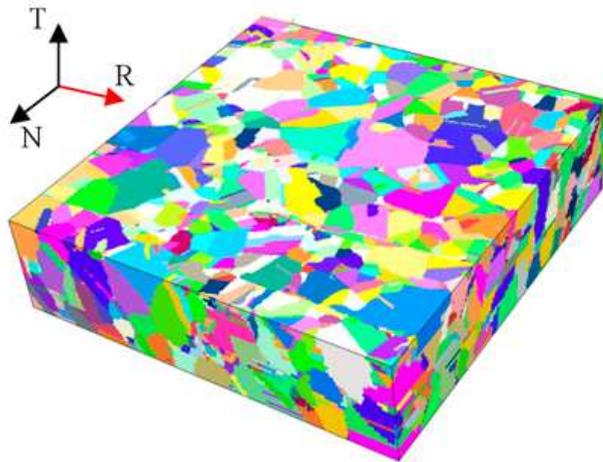


Trop fort durcissement pour $\varepsilon > 2 \%$



Volume (Élémentaire) Représentatif : Agrégat 3D

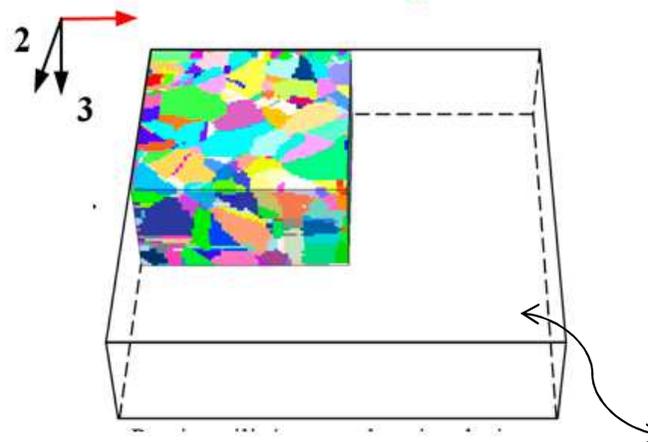
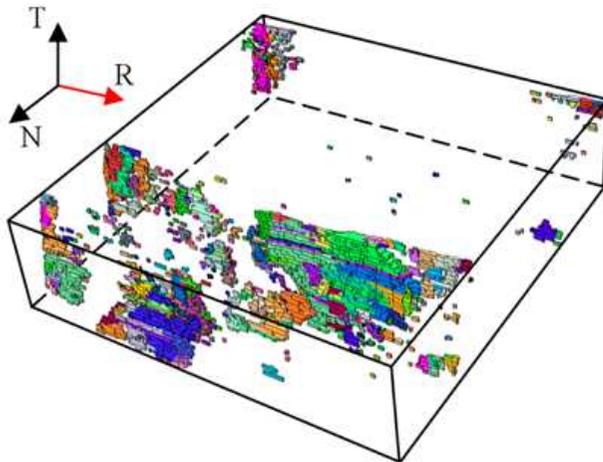
Élaboration par une succession de polissage et d'orientation par EBSD



10 millions de points EBSD
(élément $1 \times 1 \times 5 \mu\text{m}^3$)

Surface $600 \times 600 \mu\text{m}^2$

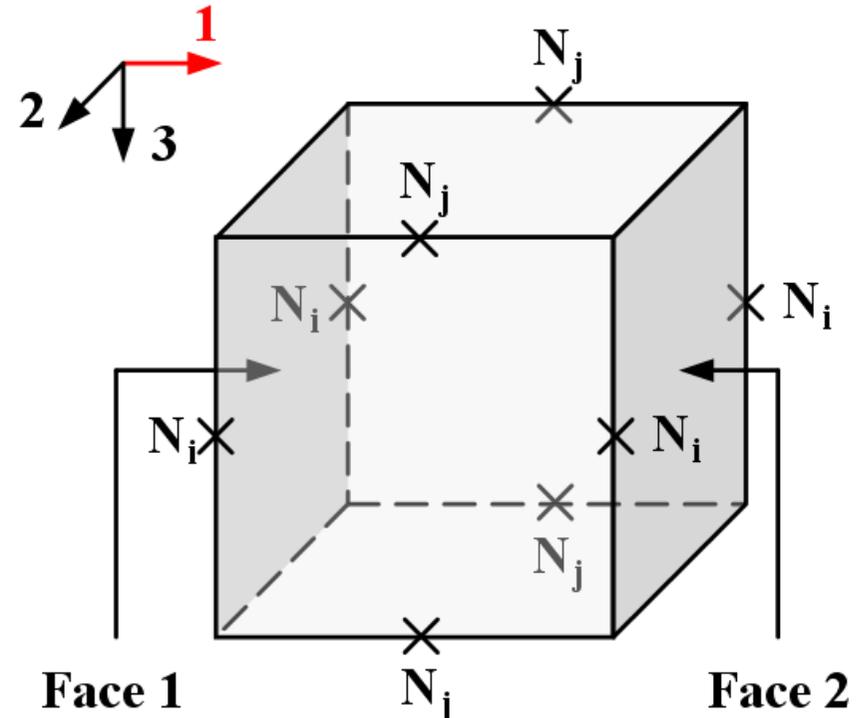
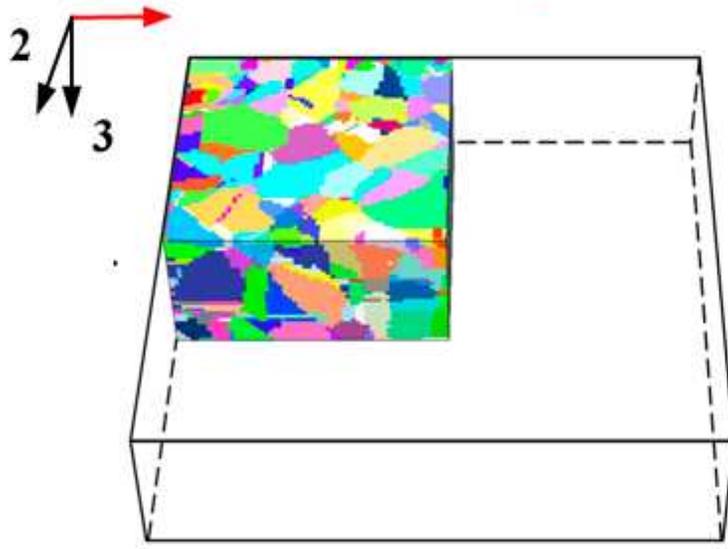
30 couches EBSD ($5 \mu\text{m}$)
Épaisseur $150 \mu\text{m}$



→ 4363 grains
(aust. : 4044; fer. : 319)

$\frac{1}{4}$ agrégat pour la simulation
(éléments de $4 \times 4 \times 5 \mu\text{m}^3$)

Conditions aux limites



Conditions aux limites utilisées pour
essai de traction (cœur/massif) et
en fatigue (une face observable en surf.)

➔ Agrégat « massif » (avec épaisseur)

Nœuds N_i : $u_3 = 0$

Nœuds N_j : $u_2 = 0$

N (Face 1) : $u_1 = 0$

N (Face 2) : $u_1 = U(t)$



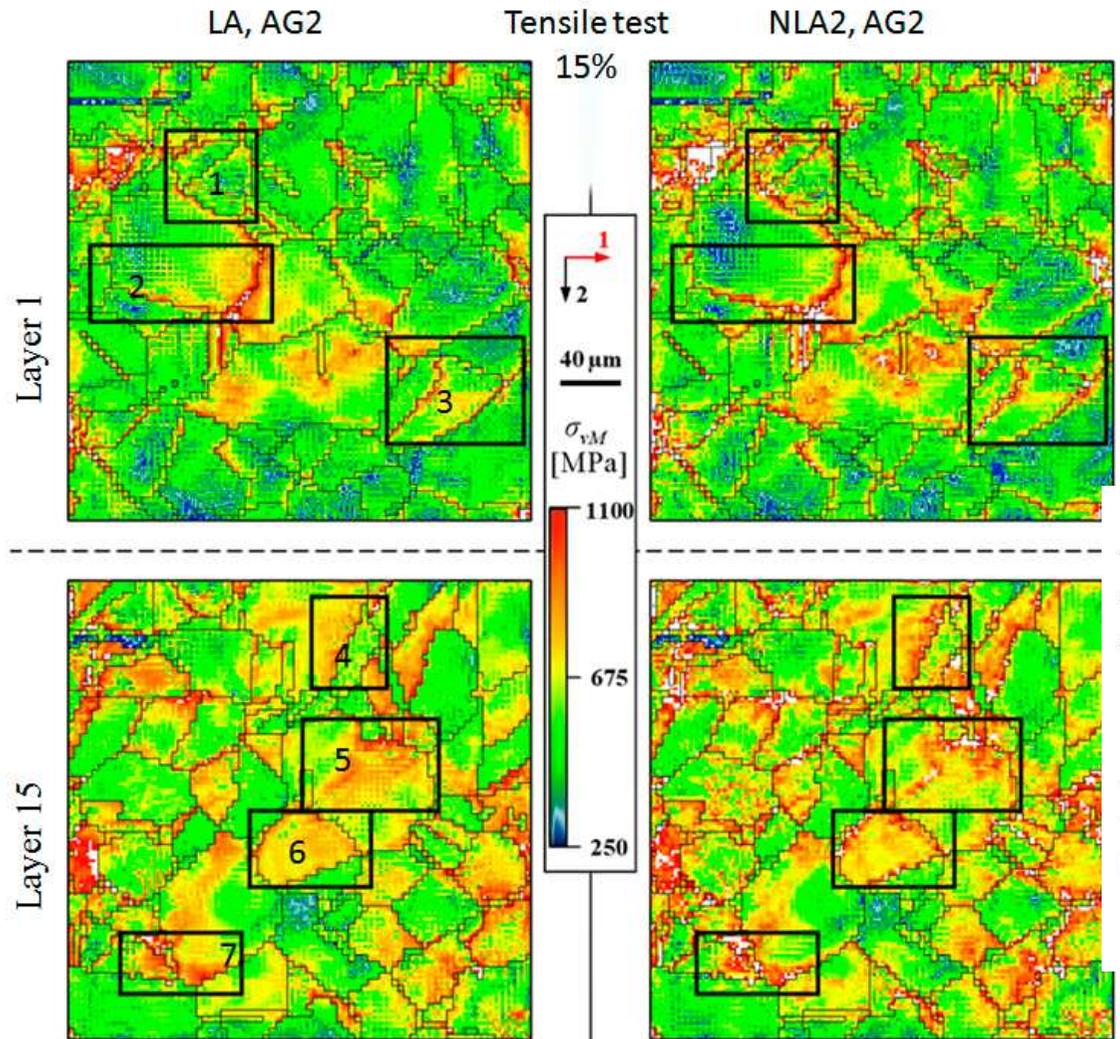
RÉSULTATS

1- Comparaisons des approches L et NL

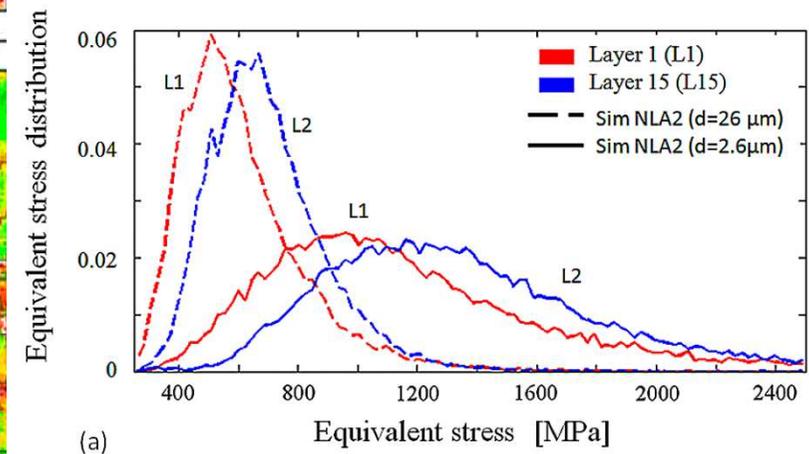
a-traction simple
b-fatigue oligocyclique

Traction simple : Comparaison des approches L et NL ($\epsilon > 1\%$)

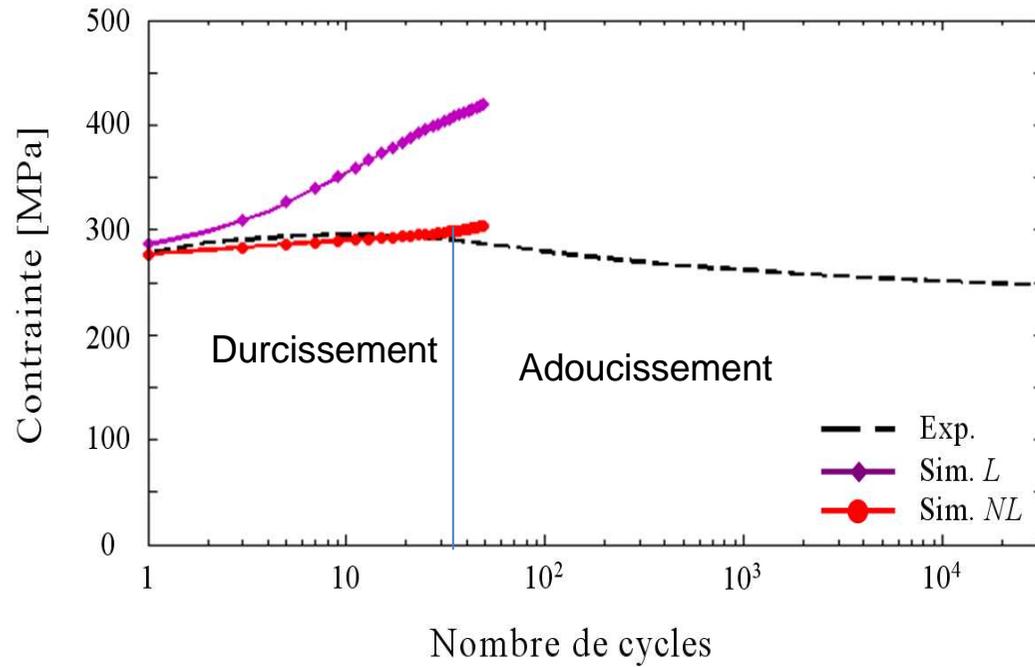
Contraintes de von Mises



Courbes de traction macroscopiques obtenues avec « agrégat réel » identiques à Expérience et Identification

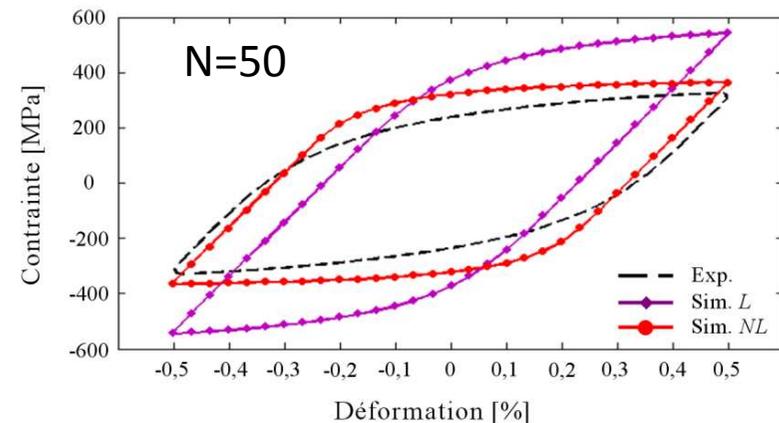
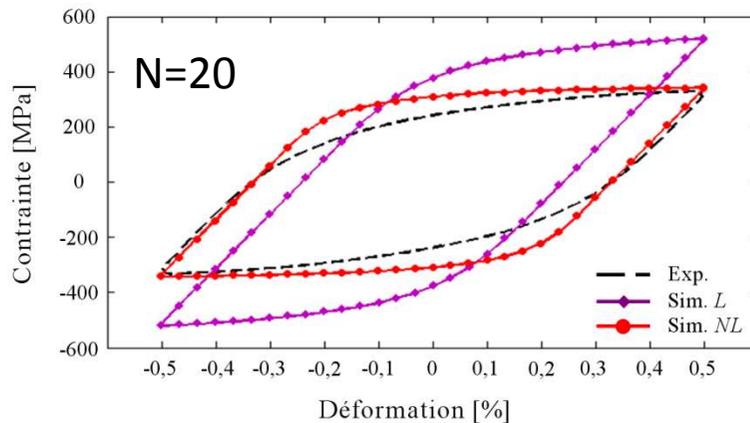
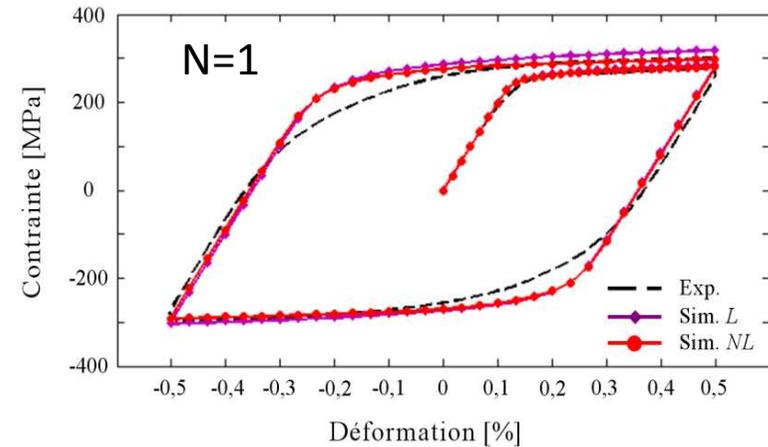


Fatigue : Comparaison des approches L et NL (courbes macroscopiques)

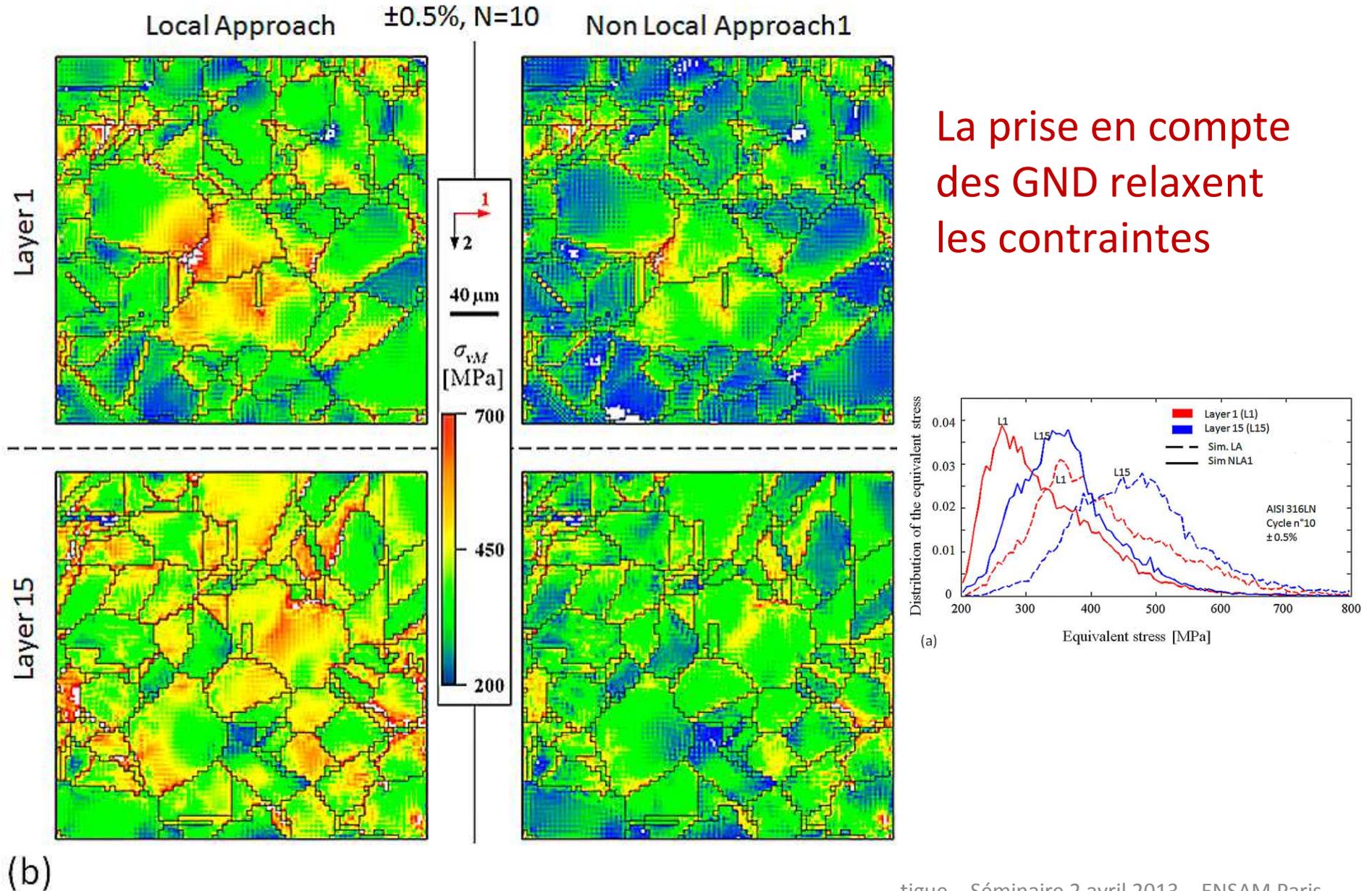


Très bonne description du durcissement cyclique

(NL pour $\epsilon < 1\%$)



Fatigue : Comparaison des approches L et NL ($\epsilon < 1\%$)





RÉSULTATS

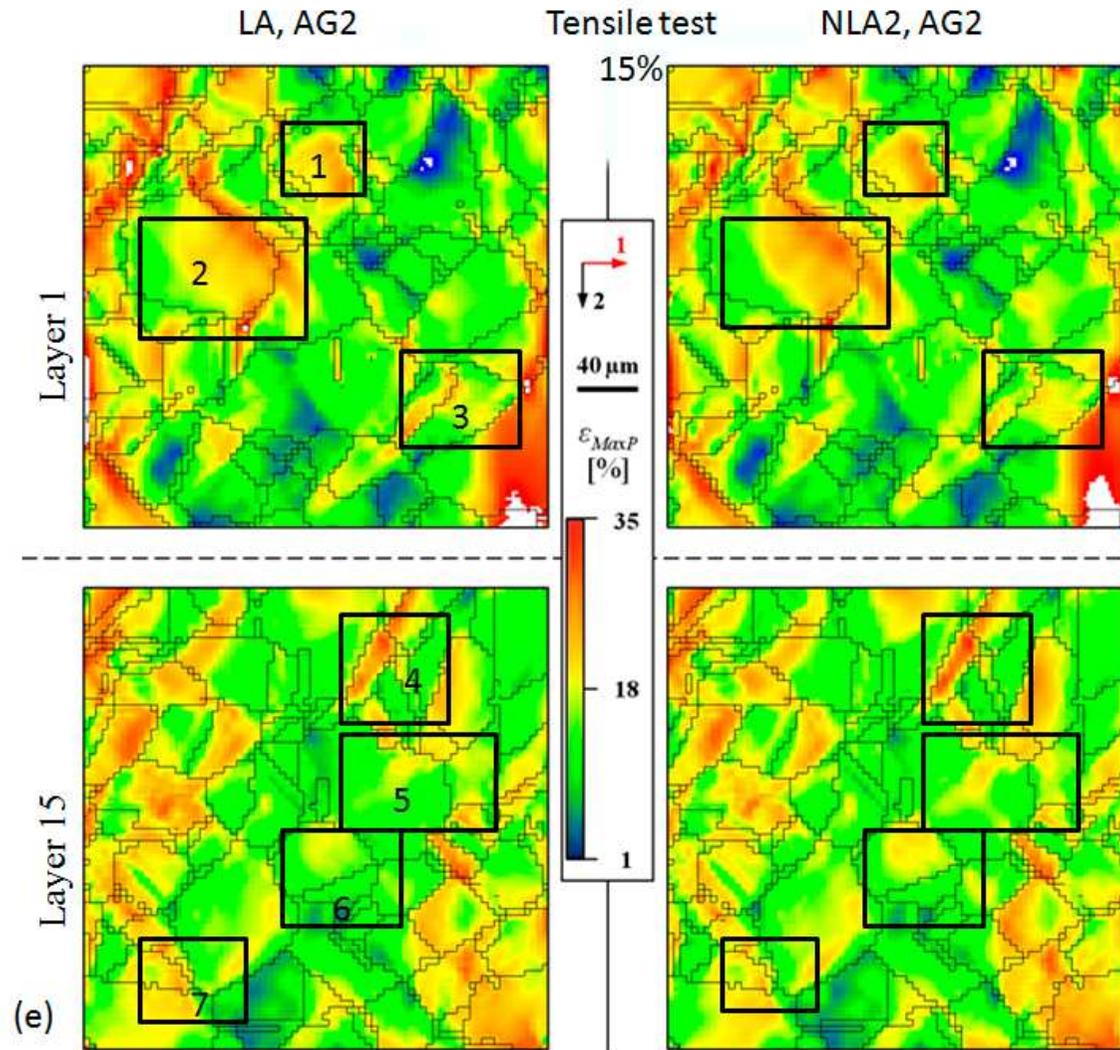
2- Effet de la taille de grains

a-traction simple

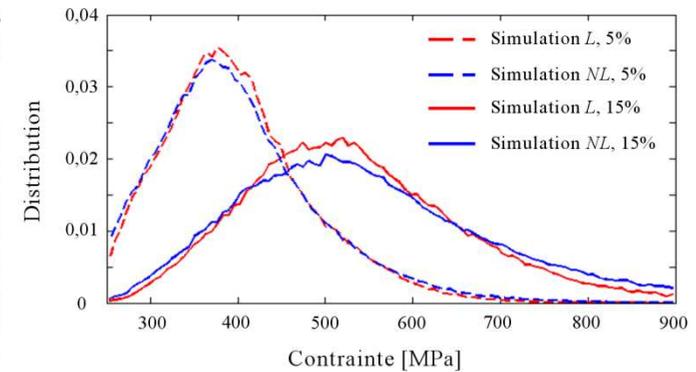
b-fatigue oligocyclique

Traction simple : Comparaison des approches L et NL ($\epsilon > 1\%$)

Déformation principale maximale



Faibles différences

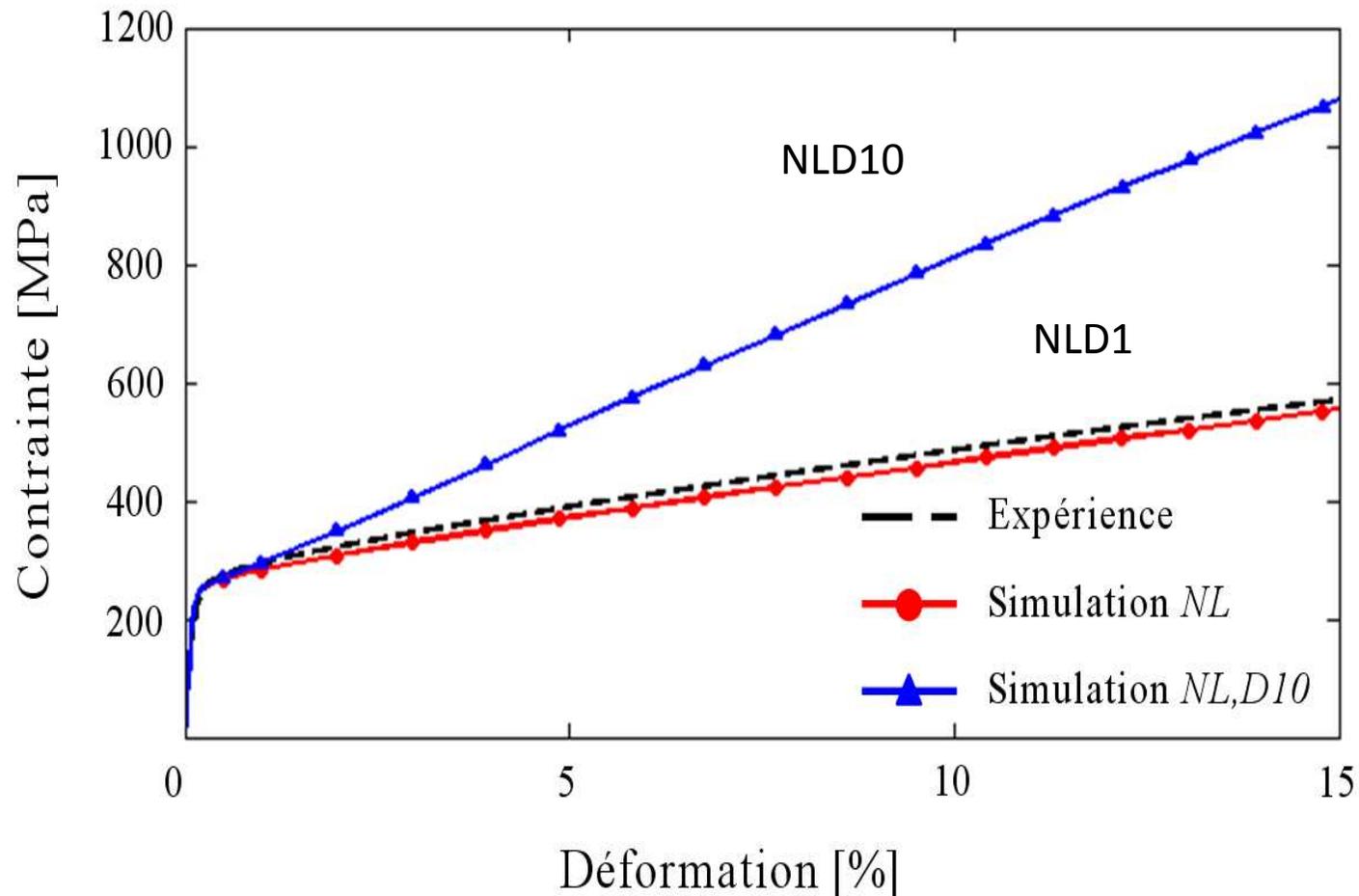


Traction simple : Effet de taille de grains (NL $\epsilon > 1\%$)

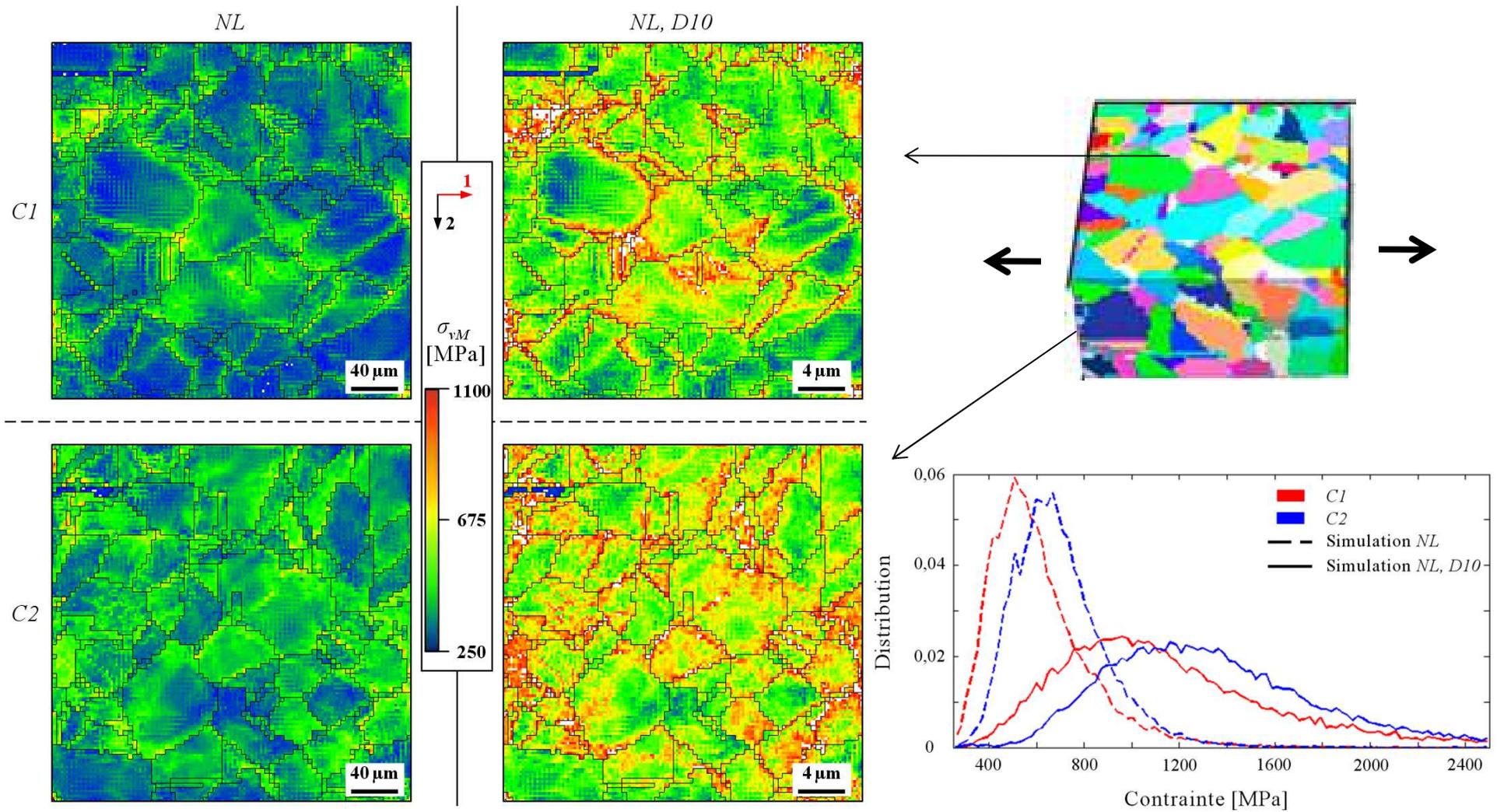
Traction suivant l'axe 1

Agrégat NLD1 ($d=27\mu\text{m}$) maillage cubique (C3D8) de $4\mu\text{m}$

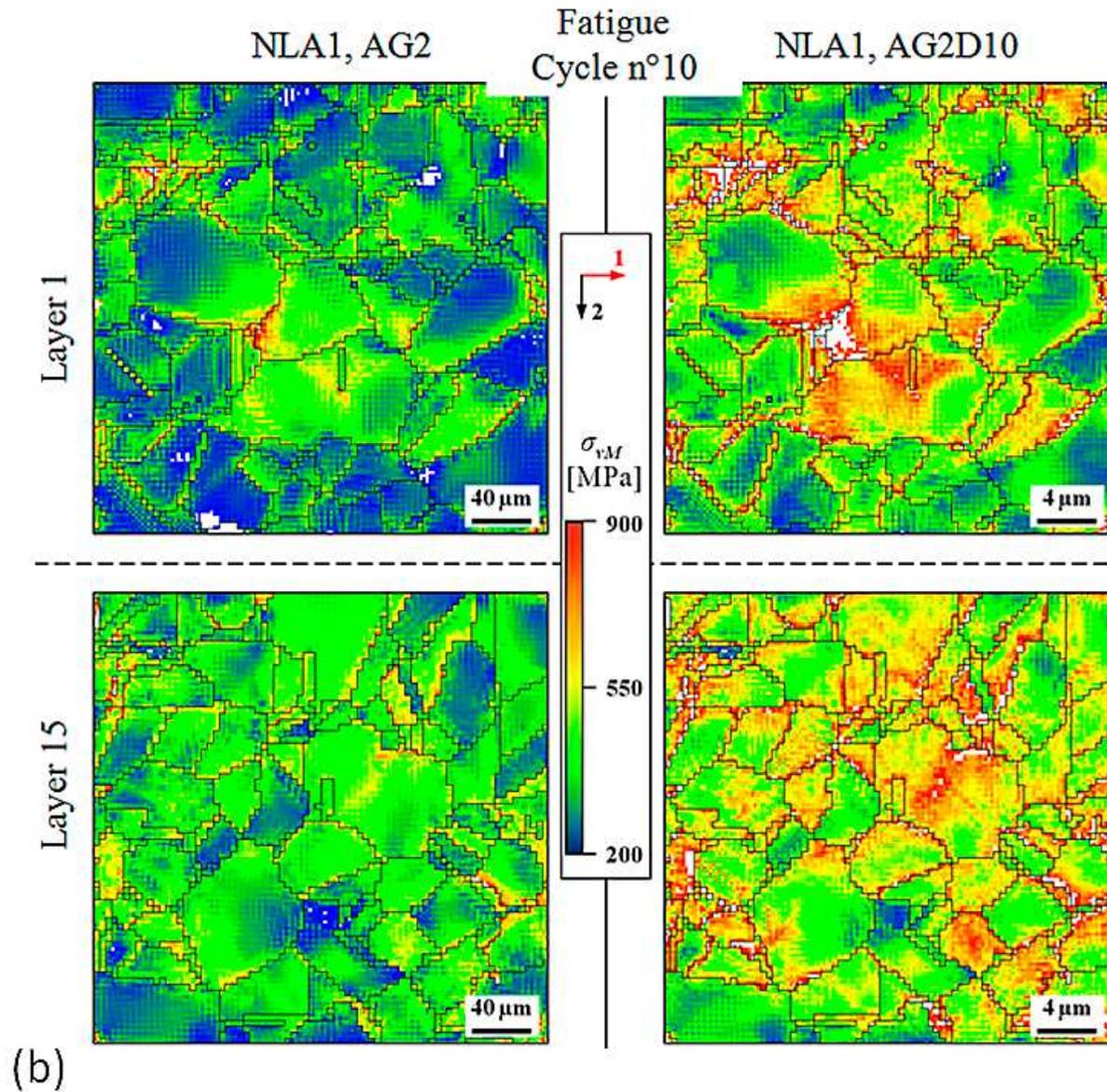
Agrégat NLD10 ($d=2,7\mu\text{m}$, maillage cubique (C3D8) de $0,4\mu\text{m}$)



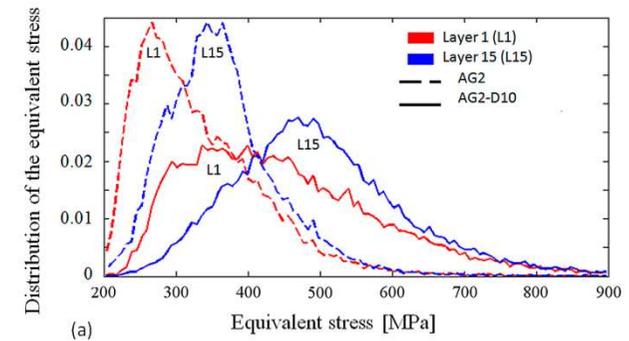
Traction simple : Effet de taille de grains (NL $\epsilon > 1\%$)



Fatigue : Effet de taille de grains (NL $\epsilon < 1\%$)



Translation des distributions de 100 MPa





CONCLUSIONS

Conclusions

- 1) Mise au point d'un *modèle de plasticité cristalline* avec prise en compte d'un terme *non local* décrivant la présence de *GND*
→ Bonne description de l'effet taille de grain
- 2) *Identification* du modèle uniquement sur des *essais de traction* puis utilisation pour décrire des essais de fatigue oligocyclique
→ bons résultats sur la Courbe Contrainte – Nombre de cycles pour le stade de durcissement grâce au terme non local

MAIS

Comparaison directe des résultats calculs sur agrégat et expérience à la même échelle encore qualitative :

- Calculs sur Agrégat 3D fiables mais observations impossibles
- Calculs pour Agrégat 2D (surface libre extrudée) encore qualitatifs bien que surface libre observée lors des essais et lors des calculs (conditions aux limites selon profondeur de l'agrégat)