

Comparaison des modèles de plasticité cristalline classique et des de plasticité à gradient pour la simulation des modes de localisation intra-granulaire de la déformation plastique au sein de polycristaux adoucissants.

A. Marano¹, L. Gélébart¹, S. Forest²

¹ DEN- Service de Recherches Métallurgiques Appliquées, CEA, Université Paris-Saclay, F-91191, Gif-sur-Yvette, France

² MINES ParisTech, PSL Research University, MAT - Centre des matériaux, CNRS UMR 7633, BP 87 9103 Evry, France

Résumé — Nous étudions la capacité des modèles de plasticité cristalline adoucissante à prédire la nature des bandes de localisation plastique dans les polycristaux à l'aide de simulations FFT haute résolution. Une analyse des champs solution permet de mettre en évidence les bandes de glissement et les bandes en genou, et démontre l'inadéquation de ces prédictions avec les observations expérimentales. Nous montrons ensuite que la plasticité à gradient permet de contrôler l'apparition des bandes selon leur nature afin de simuler plus fidèlement les mécanismes de localisation intragranulaire.

Mots clés — Localisation, Plasticité cristalline, Simulations FFT.

Introduction

Un des enjeux majeurs de la modélisation du comportement mécanique des matériaux cristallins réside dans la prise en compte de la nature intrinsèquement hétérogène du glissement plastique. Celui-ci correspond en effet au glissement de dislocations sur des plans cristallographiques, qui lorsqu'elle débouchent en surface du matériau y forment une marche discrète. Lorsque le glissement devient intense sur un ou quelques plans voisins, il se forme une bande de localisation de la déformation, parallèle au plans de glissement des dislocations, que l'on nomme une *bande de glissement*. Ce phénomène bien connu a donné lieu à des descriptions très précises [1]. Il existe néanmoins un second type de bande de localisation plastique orthogonal à la direction de glissement des dislocations et donnant lieu à une importante rotation locale du réseau cristallin. Ces bandes, appelées bandes en genou, sont observées dans les monocristaux métalliques comme mode de localisation tardif [1], dans les cristaux très anisotropes comme la glace [2] ou encore en pointe de fissure [3]. Elles nécessitent l'activation de nombreuses sources de dislocations perpendiculairement à la direction de glissement contrairement au cas des *bande de glissement* qui nécessitent l'activation d'un faible nombre de sources. Ces deux modes sont donc très différents du point de vue des mécanismes microscopiques et doivent être distingués par la modélisation.

Le rôle des mécanismes d'adoucissement local dans l'apparition de la localisation plastique a depuis longtemps été mis en évidence [4]. Dans le cas de métaux fortement adoucissants, comme les polycristaux chargés en hydrogène [5] ou les métaux irradiés [6, 7], la localisation de la déformation devient particulièrement intense et s'opère exclusivement par le mode des *bandes de glissement*. Afin de modéliser le comportement de ces matériaux, de nombreux modèles de plasticité cristalline adoucissants ont été développés [8, 9]. Ils permettent de reproduire correctement le comportement macroscopique de ces métaux. Ces modèles ont par ailleurs été utilisés pour simuler la localisation de la déformation au sein de polycristaux [10, 11]. Bien que démontrant l'apparition de bandes de localisation, ces études ont été réalisées sur des cellules bidimensionnelles et/ou avec des maillages peu raffinés, tout en ne proposant aucune analyse de la nature des bandes de localisation obtenues. Ces études ne permettent donc pas de statuer précisément quand à la capacité des modèles de plasticité cristalline adoucissants à simuler la localisation de la déformation plastique.

C'est l'objectif premier du travail présenté ici. Pour y parvenir, un modèle de plasticité cristalline adoucissant générique a été développé et utilisé au sein de simulations FFT haute résolution de microstructures polycristallines réalistes bidimensionnelles et tridimensionnelles. Les champs simulés sont

analysés à l'aide d'une méthode de post-traitement permettant d'identifier et quantifier les populations de *bandes de glissement* et de *bandes en genou* qu'ils contiennent. Les résultats montrent que ces modèles engendrent indistinctement les deux types de bandes. Dans un second temps, nous présenterons l'apport des modèles de plasticité à gradient pour influencer l'apparition d'un mode de localisation plutôt que l'autre.

1 Analyse des modes de localisation plastique prédits par la plasticité cristalline adoucissante

La cinématique du modèle de plasticité utilisé est basé sur la décomposition de Mandel du gradient de la transformation $\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_p$. Il est basé sur les deux principaux ingrédients permettant la localisation de la déformation sur des plans cristallographiques : la décomposition de la déformation plastique en somme de contributions de chacun des N_s systèmes de glissement du cristal Eq. 1 dont le glissement γ^s évolue selon la loi d'écoulement Eq. 2 ; associée à un écrouissage adoucissant Eq. 3.

$$\mathbf{L}_p = \dot{\mathbf{F}}_p \cdot \mathbf{F}_p^{-1} = \sum_s^{N_s} \dot{\gamma}^s \boldsymbol{\mu}^s \quad (1)$$

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - \tau_c^s}{K} \right\rangle^n \text{sgn}(\tau^s) \quad (2)$$

$$\tau_c^s = \tau_{c_i}^s - \Delta\tau^s \left[1 - \exp\left(-\frac{\gamma_{cum}^s}{\gamma_0^s}\right) \right] \quad (3)$$

Ce modèle est implémenté au sein du code [AMITEX_FFTP¹](#), permettant ainsi de réaliser des simulations 3D avec une résolution spatiale importante.. Afin d'étudier la localisation de la déformation plastique, les champs de rotation de réseau θ et de déformation plastique équivalente P , définis respectivement par l'Eq. 4 et l'Eq. 5 sont récupérés en sortie de ces simulations.

$$\theta = \arccos\left(\frac{1}{2}(\text{tr}(\mathbf{R}^e) - 1)\right) \quad (4)$$

$$P = \int_0^t \sqrt{\mathbf{L}_p : \mathbf{L}_p} dt \quad (5)$$

On utilise ces champs pour construire les indicatrices R et L des zones ayant respectivement une valeur de θ (P) au dessus du niveau moyen de ces champs $\bar{\theta}$ (\bar{P}) modulé par un seuil relatif : Φ_R (Φ_D) (Eq. 6 et Eq. 7). En définissant les bandes en genou comme des zones combinant une forte localisation du glissement et une forte rotation de réseau, on peut construire leur indicatrice K : Eq. 8. Les zones de localisation restantes indiquent alors la population de bandes de glissement, dont l'indicatrice est définie en conséquence par l'Eq. 9.

$$R(\mathbf{X}) = \mathcal{H}(\theta(\mathbf{X}) - \bar{\theta}\Phi_R) \quad (6)$$

$$L(\mathbf{X}) = \mathcal{H}(P(\mathbf{X}) - \bar{P}\Phi_D) \quad (7)$$

$$K(\mathbf{X}) = L(\mathbf{X}) \cdot R(\mathbf{X}) \quad (8)$$

$$S(\mathbf{X}) = L(\mathbf{X}) - K(\mathbf{X}) \quad (9)$$

Cette méthode d'analyse des champs simulés permet, en traçant ces indicatrices, de construire des cartes de localisation montrant les populations de bandes en genou et de bandes de glissement simulées. On peut voir sur la Fig. 1 que cette méthode permet une identification correcte et systématique des modes de localisation simulées à l'aide d'un modèle de plasticité cristalline.

L'analyse quantitative des fractions volumiques et niveaux de déformation moyens des deux populations de bandes permet également de mettre en évidence les différences de comportements entre les *bandes de glissement* et les *bandes en genou*. La figure Fig. 2 illustre l'évolution bien distincte des

1. <http://www.maisondelasimulation.fr/projects/amtex/html/>

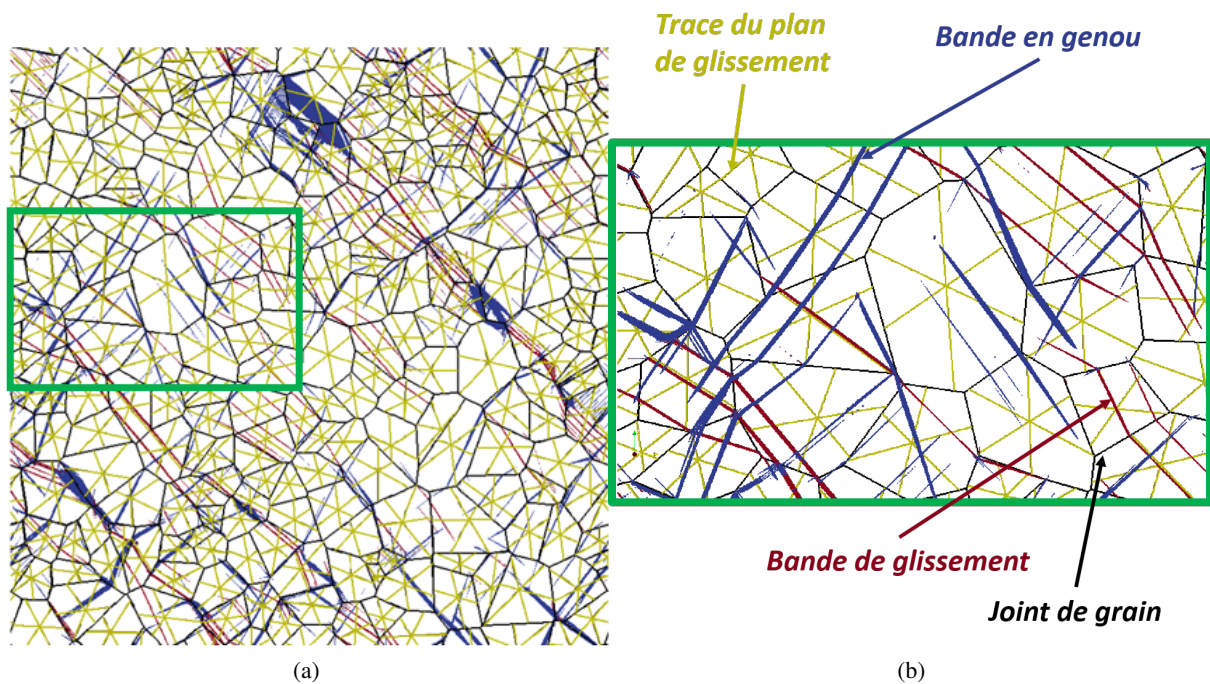


FIGURE 1 – Cartographie des bandes de localisation simulées pour un polycristal 2D. La méthode détecte bien des bandes de glissement (rouge) et des bandes en genou (bleu) toujours parallèles/orthogonales à un plan de glissement (jaune), conformément à leur définition. Les joints de grains sont figurés en noir. Résolution 750x750 voxels.

deux populations de bandes en fonction du niveau d'adoucissement imposé $\Delta\tau^s$ (Eq. 3). Ces différences s'observent également en étudiant la sensibilité au maillage ou bien l'évolution au cours du chargement des deux populations, et s'expliquent principalement par le durcissement induit par la rotation locale du réseau cristallin dans les *bandes en genou*.

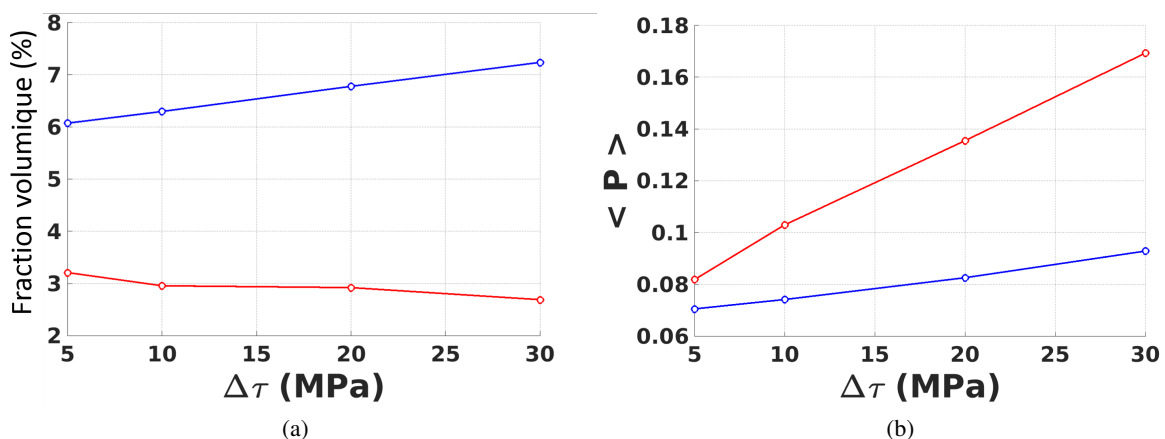


FIGURE 2 – Fraction volumique (a) et déformation plastique équivalente moyenne (b) des bandes en fonction du niveau d'adoucissement maximal après 1% de déformation en traction. Résolution 750x750 voxels. Bande de glissement en rouge, bandes en genou en bleu

Conformément à l'analyse de bifurcation de Asaro et Rice [12], notre étude montre que, à l'initiation de la déformation plastique sur un système de glissement, les deux plans de localisation correspondant à la *bande de glissement* et la *bande en genou* peuvent s'activer, de façon indistincte du point de vue de la loi de comportement. Le plan sélectionné sera le plus favorable vis à vis des contraintes de compatibilité imposées par la microstructure, comme l'illustre la figure Fig. 3 : deux simulations où les microstructures sont identiques, mais avec des systèmes de "glissement symétriques" (systèmes 111<110> et 110<111> couramment rencontrés dans les structures FCC et BCC), conduisent à l'activation des mêmes plans de

localisation ; cependant les plans des *bandes de glissement* et des *bandes en genou* ayant été interchangés, les populations de bandes le sont aussi.

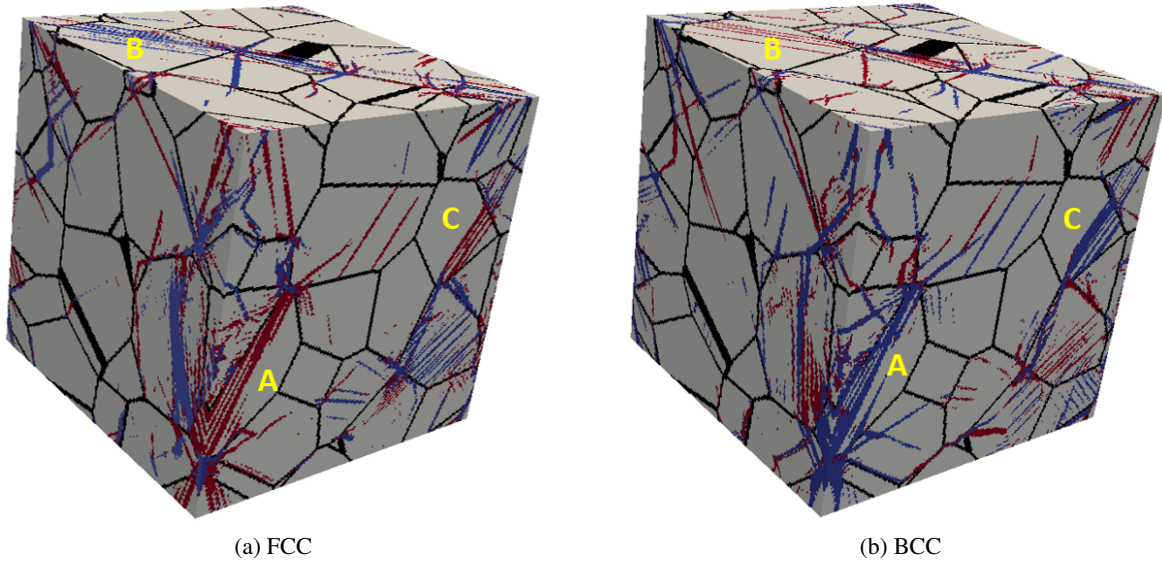


FIGURE 3 – Cartographie des bandes de localisation simulées après 1% de déformation en traction pour un polycristal 3D avec 12 systèmes $\{111\}\langle 110\rangle$ cubiques face centrée (CFC) d'une part (a) et 12 systèmes $\{110\}\langle 111\rangle$ cubique centré (CC) d'autre part (b). La géométrie et l'orientation des grains est la même dans chaque simulation. Les bandes marquées par des lettres illustrent la correspondance quasi parfaite entre bandes de glissement du CFC et bandes en genou du CC (et inversement). Bande de glissement en rouge, bandes en genou en bleu

2 Régularisation des bandes en genou à l'aide de la plasticité à gradient

Les modèles de plasticité cristalline adoucissante classiques ne permettent donc pas de différencier le mécanisme de formation des deux types de bandes de localisation, et produisent ainsi des populations de bandes en genou très importantes. Or, elles n'ont jamais été signalées dans les cas des matériaux possédant de forts mécanismes adoucissants, comme les matériaux irradiés. Afin de simuler plus fidèlement la nature des bandes de localisation pour de tels matériaux, un modèle de plasticité à gradient a été introduit dans le code AMITEX_FFTP afin de pénaliser l'apparition des bandes en genou. Sur la base de la théorie de Gurtin [13], dans le cadre des petites perturbations, une dépendance quadratique au tenseur de Nye $\alpha = \text{rot}(\mathbf{F}_p)$, mesurant la courbure du réseau cristallin, est introduite dans l'énergie libre du matériau Eq. 10. En conséquence, la loi d'écoulement Eq. 2 est modifiée pour incorporer une contrainte interne χ^s (Eq. 11) dépendant de la courbure du réseau (Eq. 12).

$$\psi = \psi_{el} + \lambda^2 \pi_0 \|\alpha\|^2 \quad (10)$$

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - \chi^s| - \tau_c^s}{K} \right\rangle^n \text{sgn}(\tau^s) \quad (11)$$

$$\chi^s = -\lambda^2 \pi_0 \cdot \text{rot}(\text{rot}(\mathbf{F}_p)) : \boldsymbol{\mu}^s \quad (12)$$

La courbure du réseau étant importante dans les *bandes en genou* et faible dans les *bandes de glissement*, ce modèle pénalise donc l'apparition des premières, comme l'illustre la figure Fig. 4. Sur ces simulations d'un monocristal périodique en glissement simple, les deux bandes se forment lorsque l'impact énergétique de la courbure du réseau est nulle ($\lambda = 0$) tandis que la bande en genou disparaît lorsqu'ils sont pris en compte.

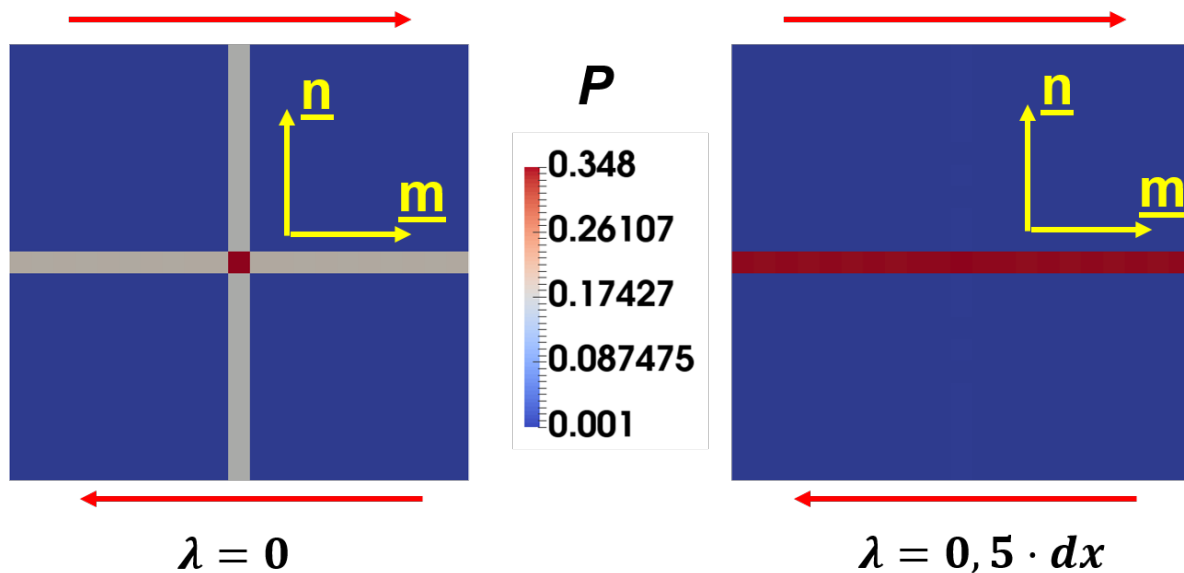


FIGURE 4 – Champ de déformation plastique équivalente simulé pour un monocristal en glissement simple pour deux valeurs de la longueur caractéristique du modèle de plasticité à gradient λ . Le champ obtenu pour $\lambda = 0$ (équivalent à un modèle local) montre une localisation en deux bandes : une bande en genou et une bande de glissement. La prise en compte des effets de gradients dans le second cas induit la disparition de la bande en genou. m (resp. n) est la direction de glissement (resp. la normale au plan de glissement) ; Grille de 40×40 voxels de taille dx^3

Conclusion

Cette étude a permis de mettre en évidence les comportements mécaniques différents des deux types de bandes de localisation, ainsi que leurs mécanismes de formation dans les simulations réalisés avec des modèles de plasticité cristalline adoucissants et locaux. L'impossibilité de distinguer les mécanismes d'apparition des bandes de glissements et des bandes en genou mise en évidence au sein de ces modèles constitue une limite fondamentale de leur capacité à reproduire fidèlement la localisation intragranulaire de la déformation dans les matériaux cristallins. Au contraire, ce travail démontre que les modèles de plasticité à gradient permettent eux de favoriser ou non l'apparition d'un de ces deux modes.

Références

- [1] B. Jaoul, *Etude de la plasticité et application aux métaux*, Les Presses - Mines ParisTech, 1964
- [2] C.J.L Wilson, J.P. Burg, J.C. Mitchell. *The origin of kinks in polycrystalline ice*, Tectonophysics, 127, 27-48, 1986.
- [3] J.W. Jysar, C.L. Briant. *Crack tip deformation fields in ductile single crystals*, Acta Materialia, 50, 2367-2380, 2002.
- [4] Y. Estrin, L.P. Kubin. *Local strain hardening and nonuniformity of plastic deformation*, Acta Metallurgica, 50, 2455-2464, 1986.
- [5] I. Aubert, N. Saintier, J. Olive *Crystal plasticity computation and atomic force microscopy analysis of the internal hydrogen-induced slip localization on polycrystalline stainless steel*, Scripta Materialia, 66, 698-701, 2012.
- [6] F. Onimus, L. Dupuy, F. Momprou *A statistical TEM investigation of dislocation channeling mechanism in neutron irradiated zirconium alloys*, Journal of Nuclear Materials, 328, 165-179, 2004.
- [7] T.S. Byun, N. Hashimoto, K. Farrell, E.H. Lee *Characteristics of microscopic strain localization in irradiated 316 stainless steels and pure vanadium*, Journal of Nuclear Materials, 349, 251-264, 2006.
- [8] S. Krishna, A. Zamiri, S. De *Dislocation and defect density-based micromechanical modeling of the mechanical behavior of fcc metals under neutron irradiation*, Philosophical Magazine, 90, 4013-4025, 2010.
- [9] A. Patra, D.L. McDowell *Crystal plasticity-based constitutive modelling of irradiated bcc structures*, Philosophical Magazine, 92, 861-887, 2012.

- [10] A. Patra, D.L. McDowell *Crystal plasticity investigation of the microstructural factors influencing dislocation channeling in a model irradiated bcc material*, Acta Materiala, 110, 364-376, 2016.
- [11] T.O. Erinoshio , F.P.E. Dunne *Strain localization and failure in irradiated zircaloy with crystal plasticity*, International Journal of Plasticity, 110, 170-194, 2015.
- [12] R.J. Asaro , J.R. Rice *Strain localization in ductile single crystals*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 25, 309-338, 1977.
- [13] M.E. Gurtin *A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations.*, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 50, 5-32, 2002.