



# 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)

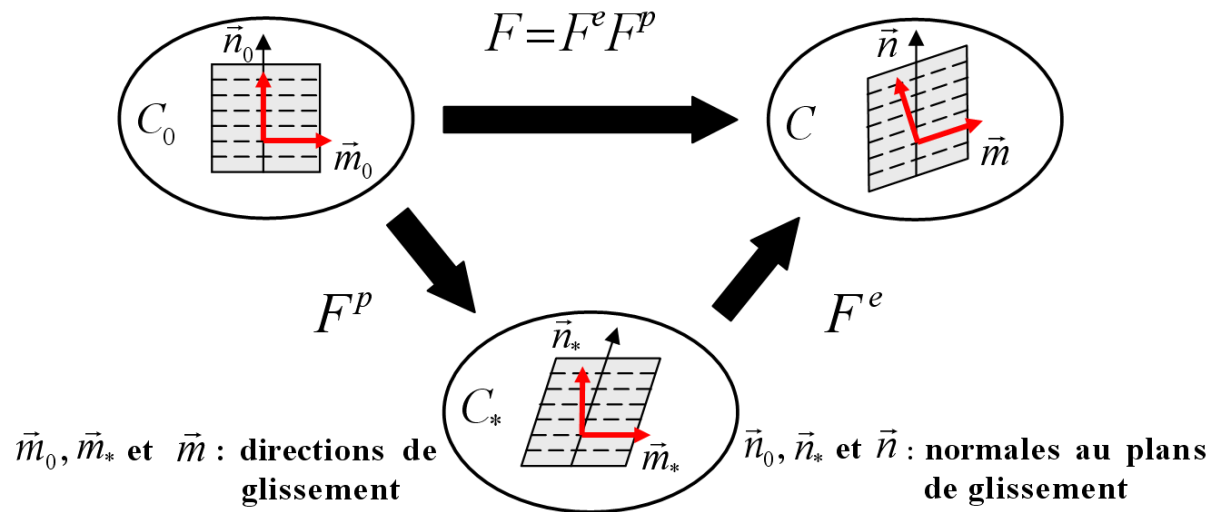
## Application :

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



# LES MODÈLES DE PLASTICITÉ CRISTALLINE

# Transformations finies (Asaro 83, Pierce 84)



$$\tilde{D}^e = \dot{\tilde{\epsilon}}^e$$

$$\tilde{D}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s (\vec{m}^s \otimes \vec{n}^s)_S$$

$$\tilde{W}^e = \dot{\tilde{R}}^e \tilde{R}^{e-1}$$

$$\tilde{W}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s (\vec{m}^s \otimes \vec{n}^s)_{AS}$$

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

$$\dot{\tilde{R}}^e = \tilde{R}^e \cdot \left( \tilde{W} - \sum_s \tilde{W}^s \right)$$

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

# 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)

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

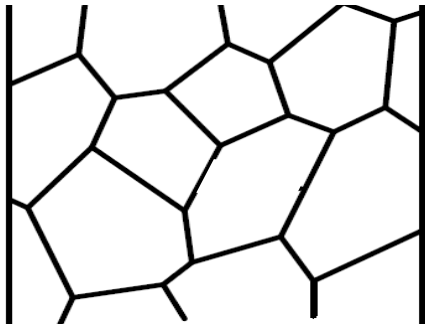
Variables internes : **densité de dislocations sur les systèmes de glissement**

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

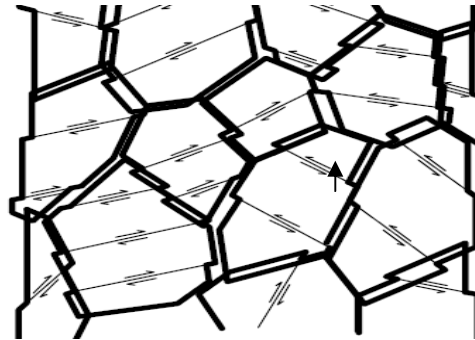
- **Ecrouissage anisotrope**
- **Faible écrouissage cinématique**

# Dislocations géométriquement nécessaires (GND)

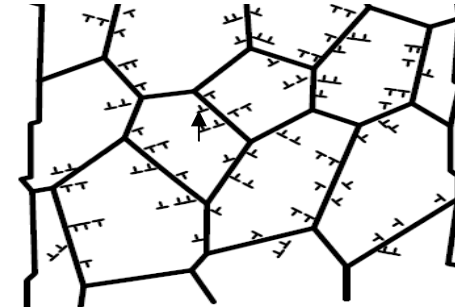
Incompatibilité à l'échelle du polycristal : *Nye*, *Kröner*, modèle d'*Ashby* 1970



Polycristal



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

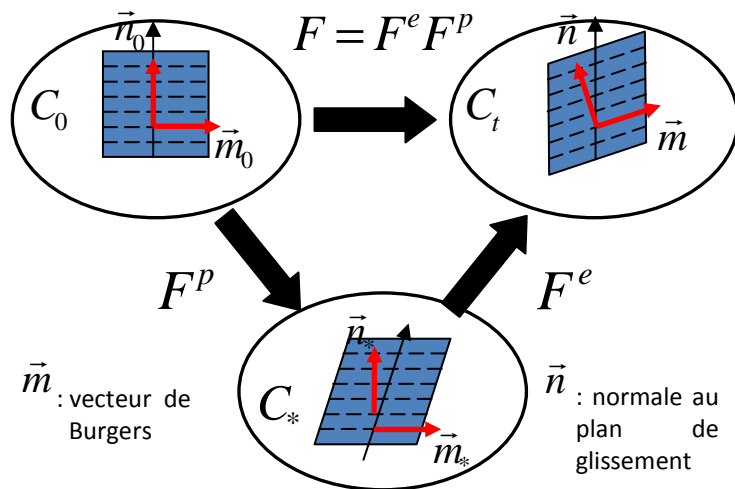


Dislocations Géométriquement Nécessaires → restaurent la compatibilité

**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.)

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

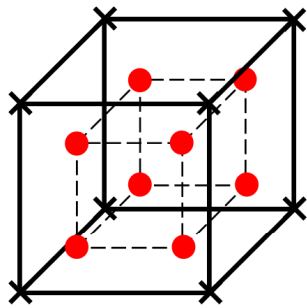
$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left( k_0 \alpha^s + \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - 2 y_c \rho^s \right)$$

$k_0$  paramètre à identifier

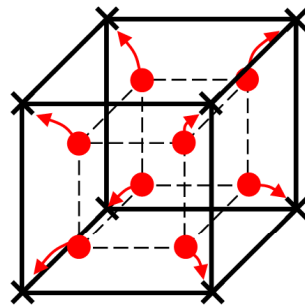
# Modèle de plasticité cristalline Non Local (CristalECP\_NLoc)

Principe de l'implémentation du terme non local  
(codes EF Abaqus<sup>TM</sup> et Cast3m<sup>TM</sup>)

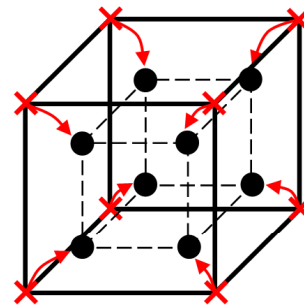
Comment calculer un gradient de rotation élastique?



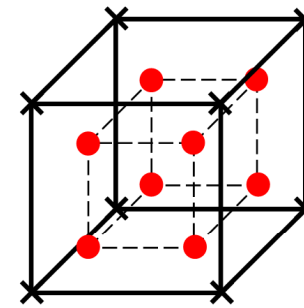
À la fin d'un pas de temps :  $\bar{R}$  aux points d'intégration



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



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

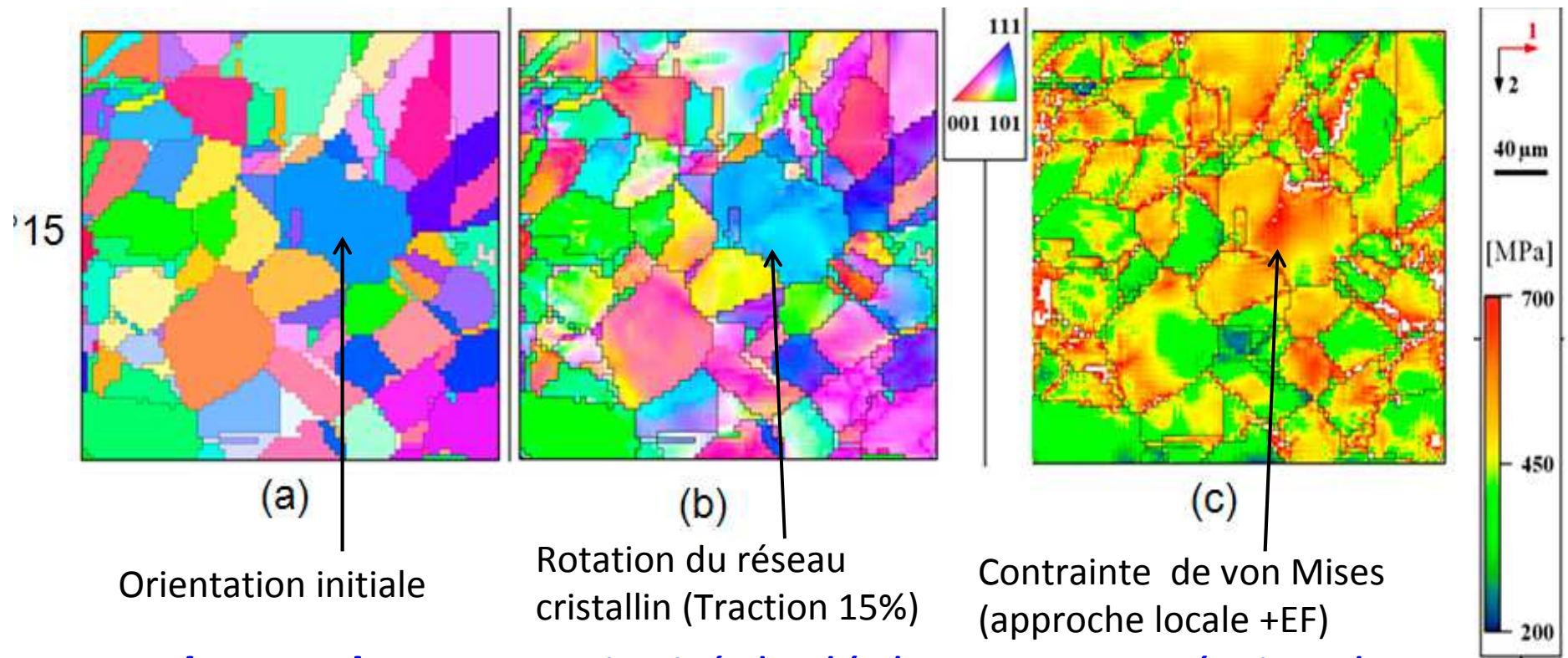


Étape 3 : projection de  $\bar{a}$  sur chaque système de glissement

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 |
|-----------------------|------------|------------|----------------------------|----------|-----|--------------------|-----|-------|--------------------|-----|---------------------|
| $C^e_{11}$            | $C^e_{12}$ | $C^e_{44}$ | $\alpha^{su}$              | $\tau_0$ | $b$ | $\rho^s_0$         | $K$ | $y_c$ | $\gamma'_0$        | $n$ | $k_0$               |
| [GPa]                 | [GPa]      | [GPa]      | [-]                        | [MPa]    | [m] | [m <sup>-2</sup> ] | [-] | [m]   | [s <sup>-1</sup> ] | [-] | [-]                 |

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

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

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

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

➤ Données bibliographiques :

Constantes élastiques (isotrope ou anisotrope)

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

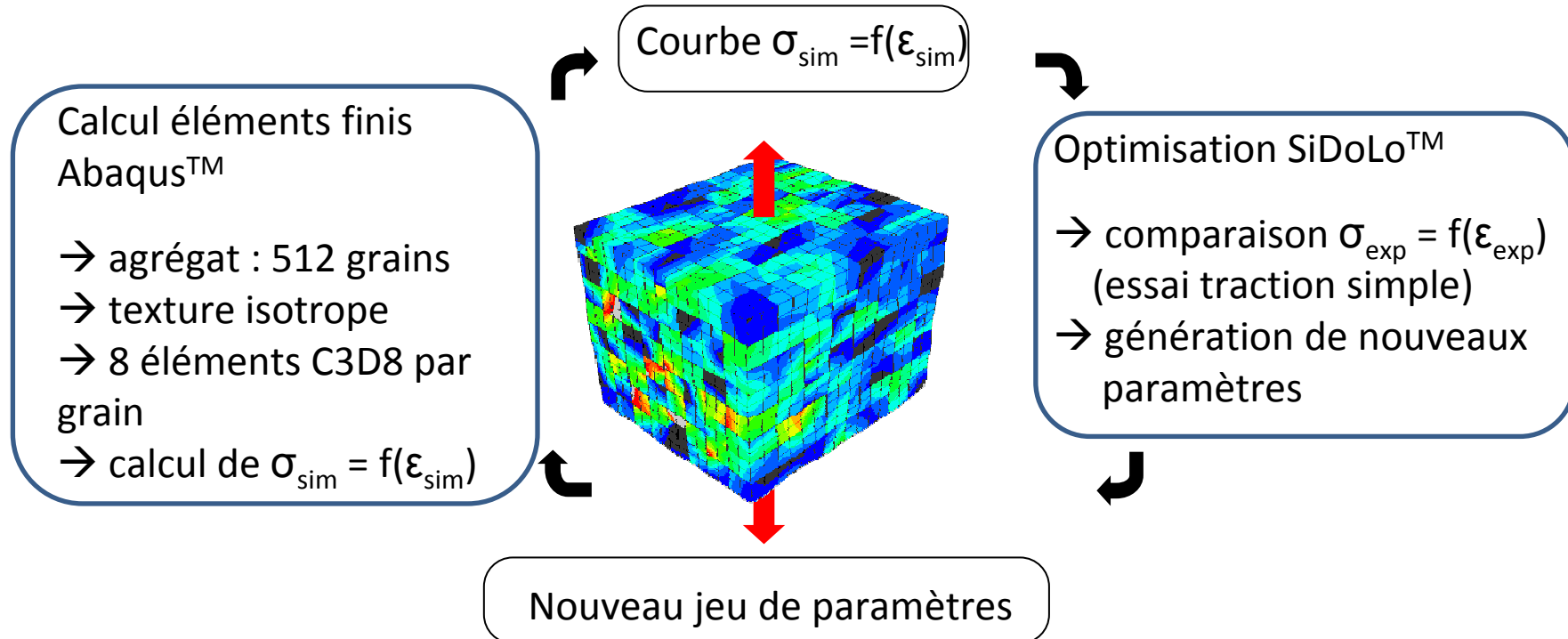
Matrice d'interaction des dislocations  $a^{su}$  (Franciosi 1983, Devincere 2008)

➤ Observations microstructurales : densité de dislocations initiale  $\rho^s_0$  (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 $3.10^{-3} \text{ s}^{-1}$

## 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)

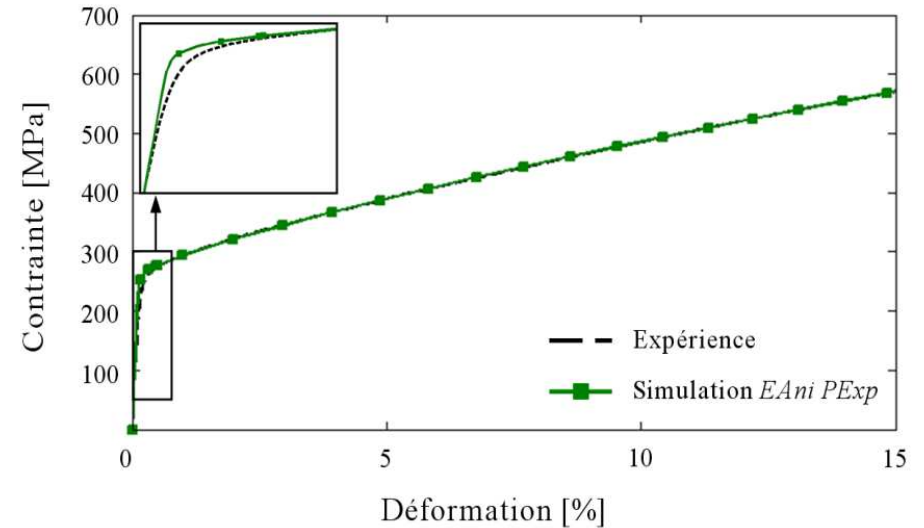
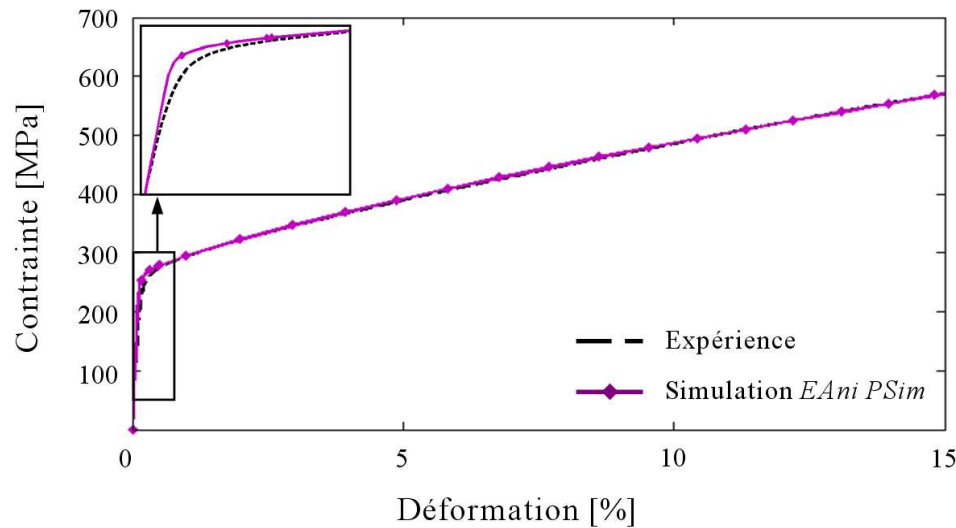
|                  | $a_0^{\text{aut}}$ | $a_1^{\text{col}}$ | $a_1^{\text{cop}}$ | $a_1^{\text{ort}}$ | $a_2^{\text{glis}}$ | $a_3^{\text{ses}}$ |
|------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|---------------------|--------------------|
| PExp (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)                 | $\rho_0^s$ (m <sup>-2</sup> )    | $\dot{\gamma}_0$ (s <sup>-1</sup> ) | 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 :

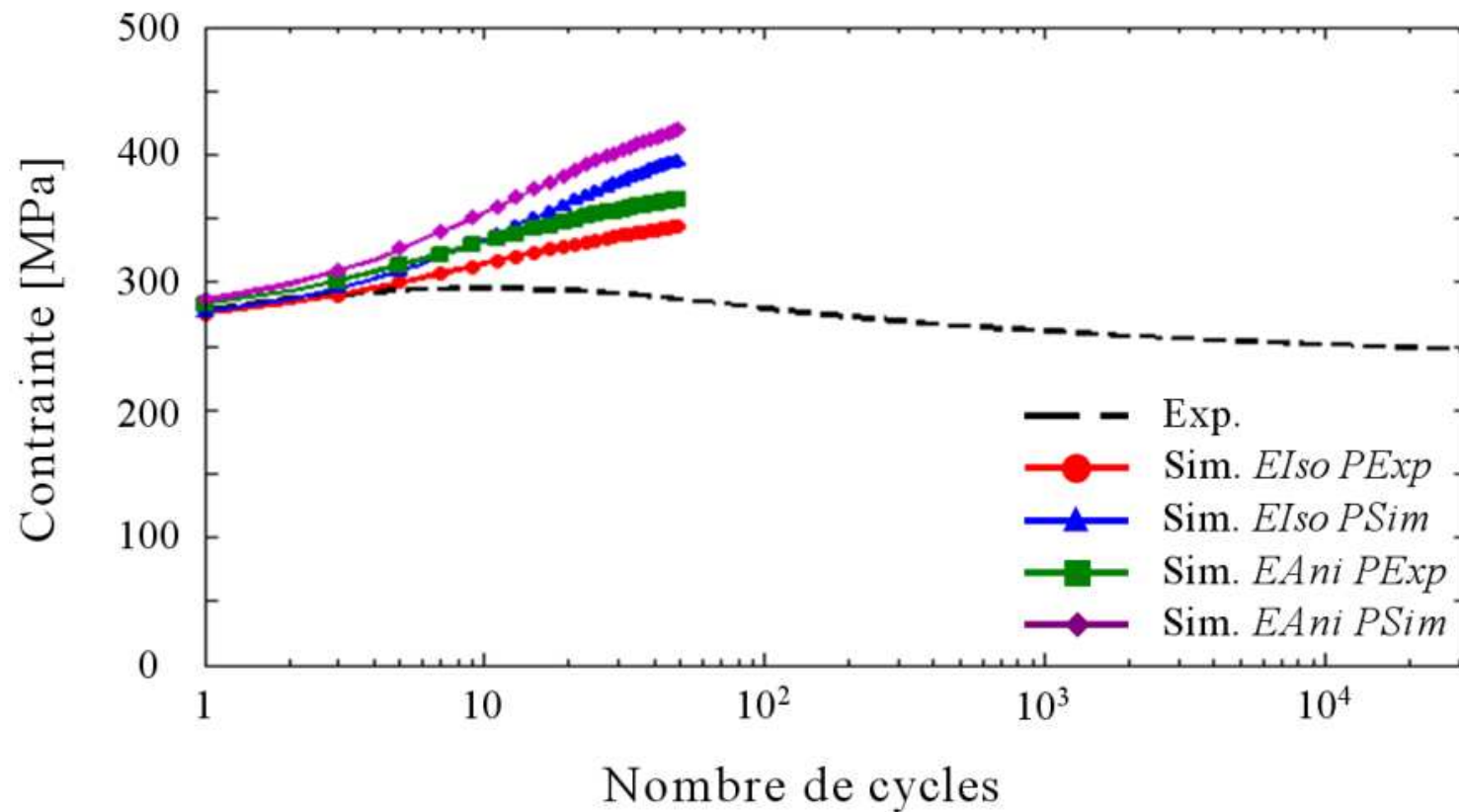
Les 4 jeux de paramètres donnent des résultats quasi-identiques

Dans tous les cas :

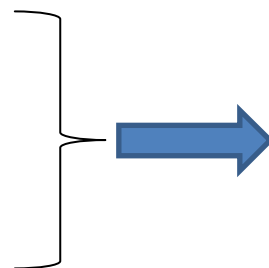
Léger désaccord dans le stade de microplasticité :  $\epsilon < 1 \%$

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

# Résultats de l'approche locale en fatigue



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



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

# Modèle Non Local - Identification

Nouvelle identification de  $\tau_0$ ,  $K$  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

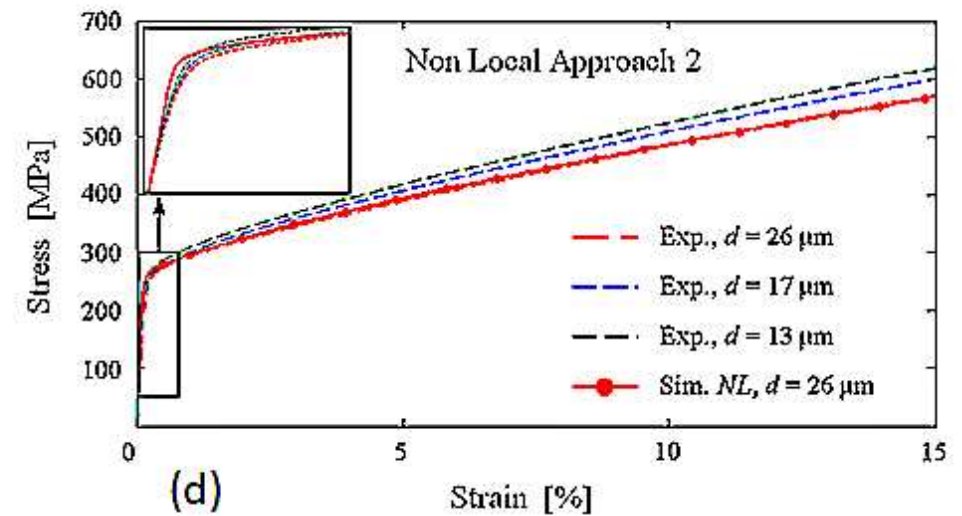
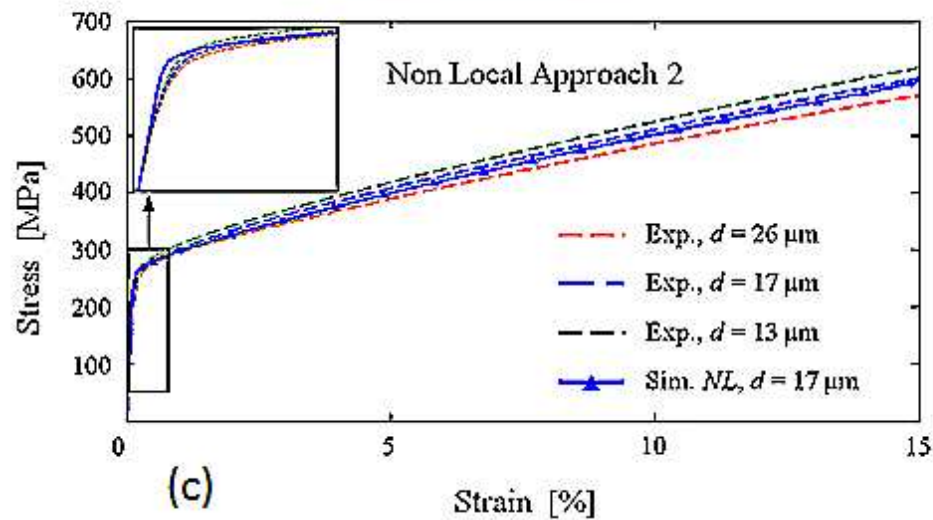
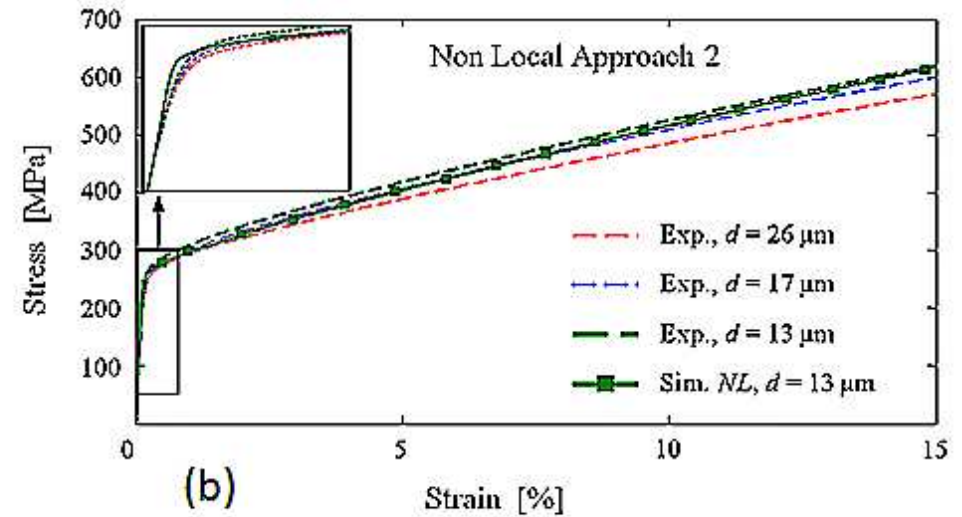
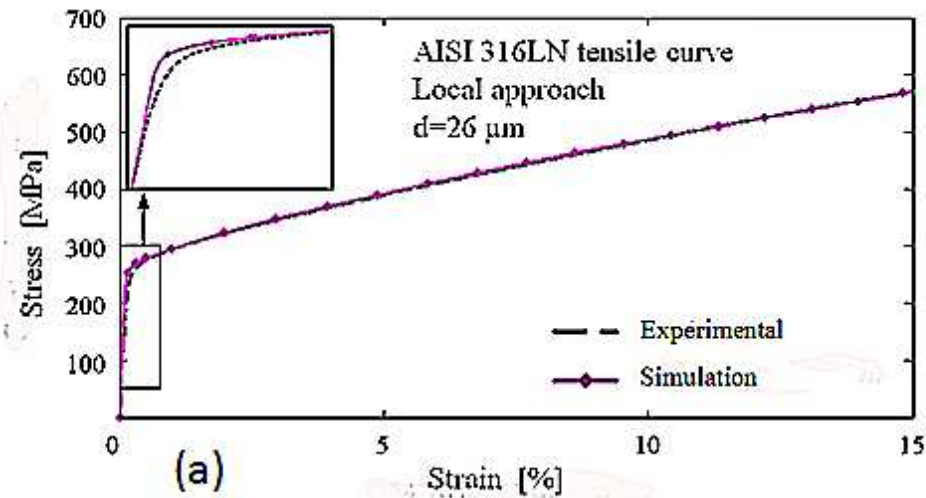
|                           |           | Tau0 (MPa) | K (-) | $y_c$ (m)            | $k_0$ (-) |
|---------------------------|-----------|------------|-------|----------------------|-----------|
| Traction $\epsilon > 1\%$ | Local     | 22.30      | 59.97 | $1.29 \cdot 10^{-9}$ | 0         |
| Traction $\epsilon < 1\%$ | 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  $\epsilon$

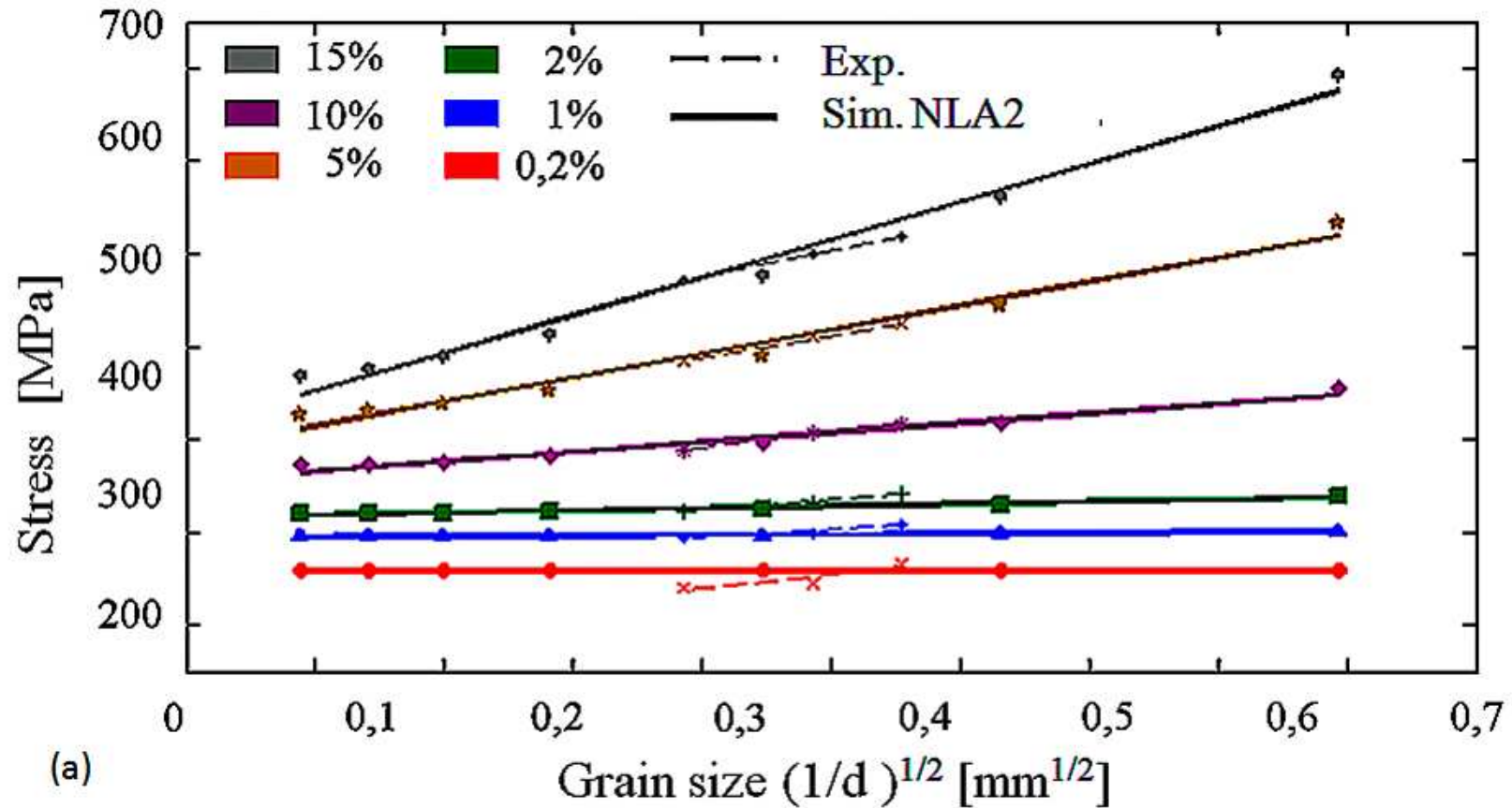
# Traction simple : Comparaison des modèles Loc et NLoc

Identification pour  $\epsilon > 1\%$



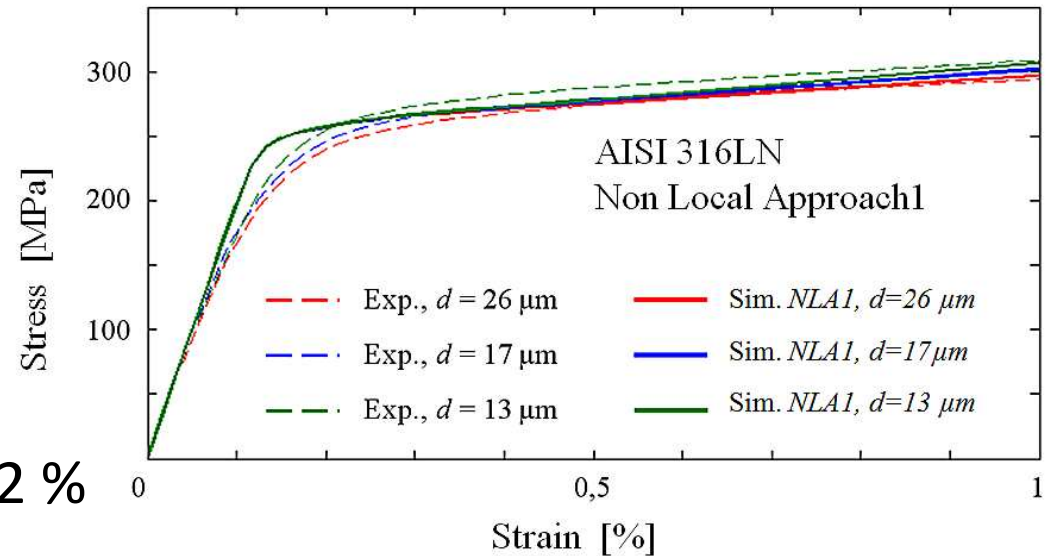
# Traction simple : Validation du modèle NLoc

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

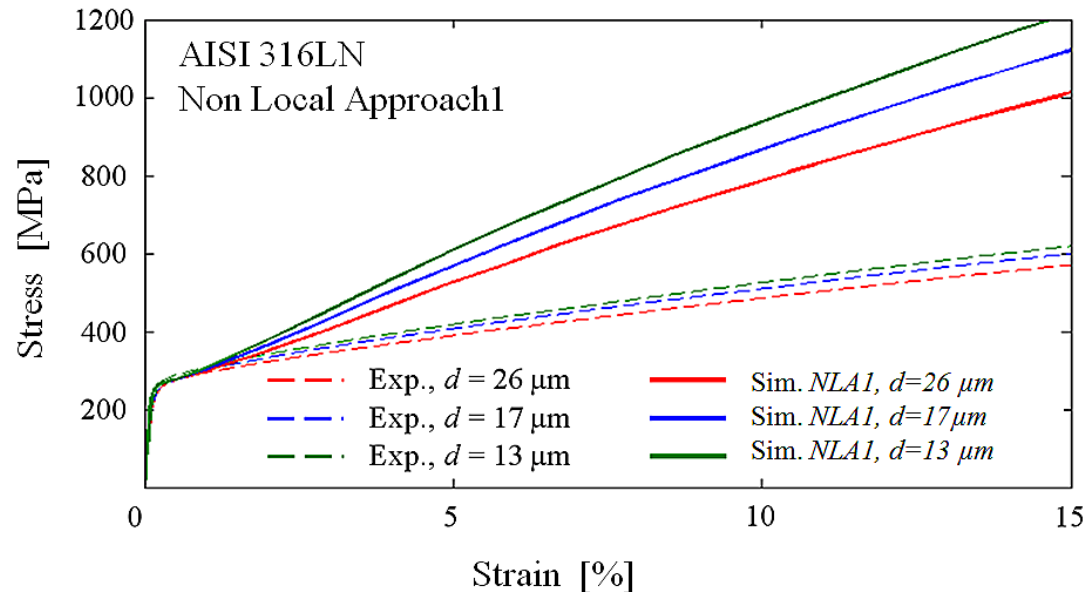


# Traction simple : Comparaison des modèles Loc et NLoc

$\varepsilon < 1 \%$

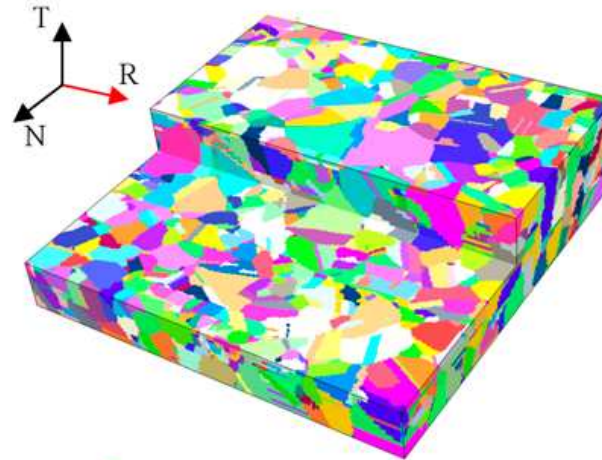
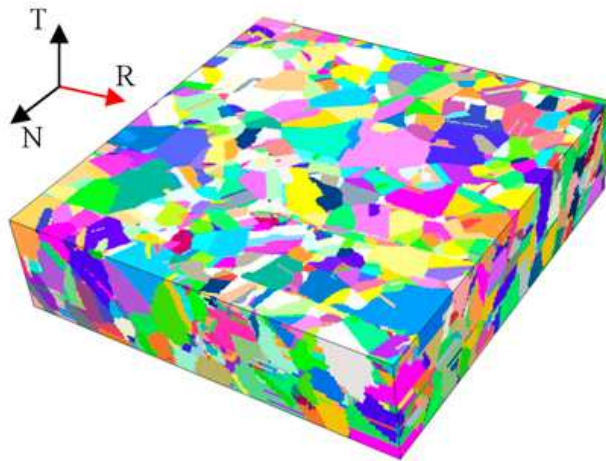


Trop fort durcissement pour  $\varepsilon > 2 \%$



# Volume (Élémentaire) Représentatif : Agrégat 3D

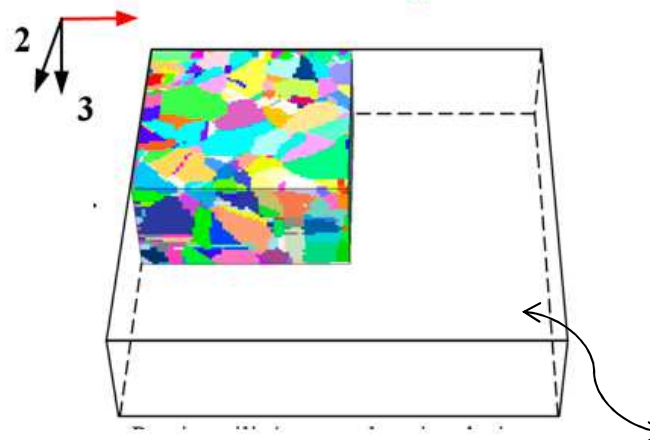
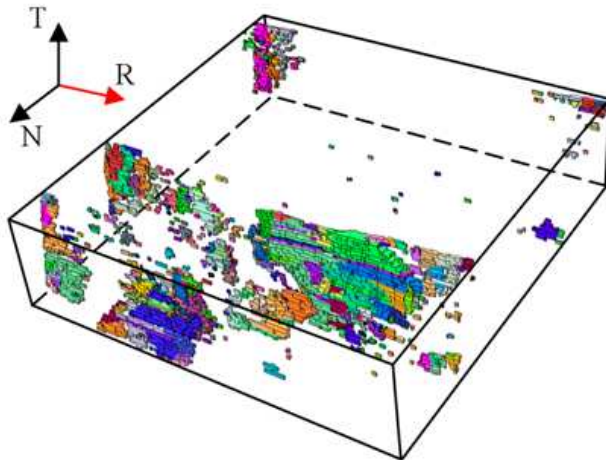
Élaboration par une succession de polissage et d'orientation par EBSD



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  $150 \mu\text{m}$

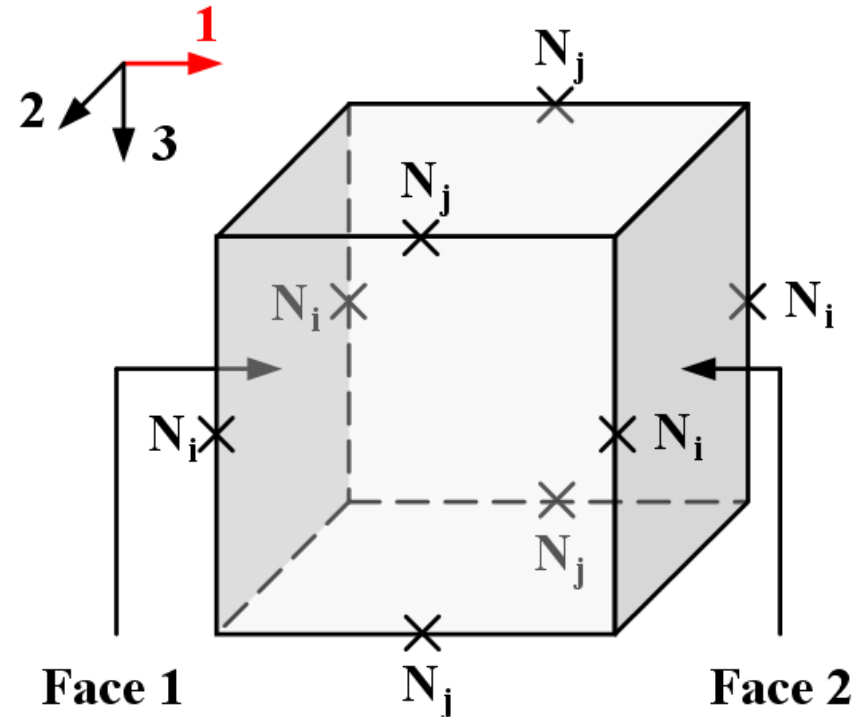
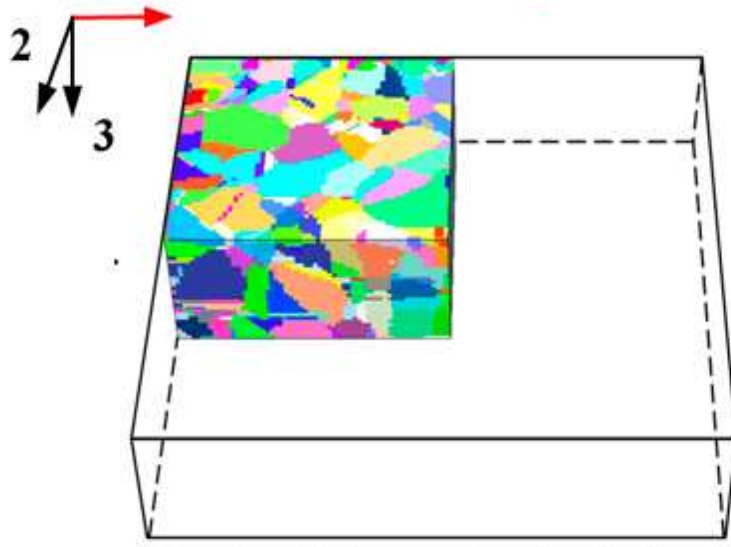


→ 4363 grains  
(aust. : 4044; fer. : 319)

¼ 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) :  $u_1 = U(t)$**



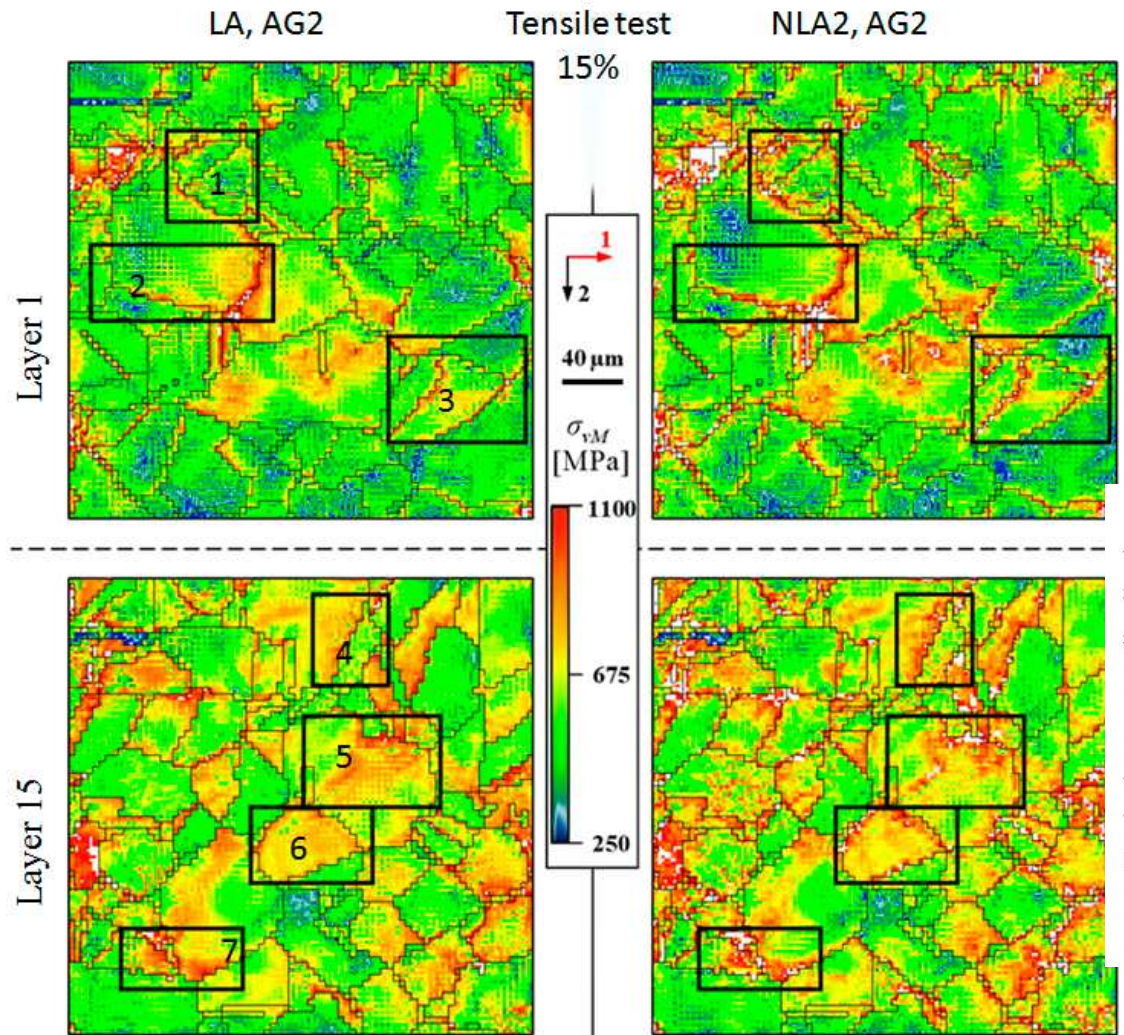
# RÉSULTATS

## 1- Comparaisons des approches L et NL

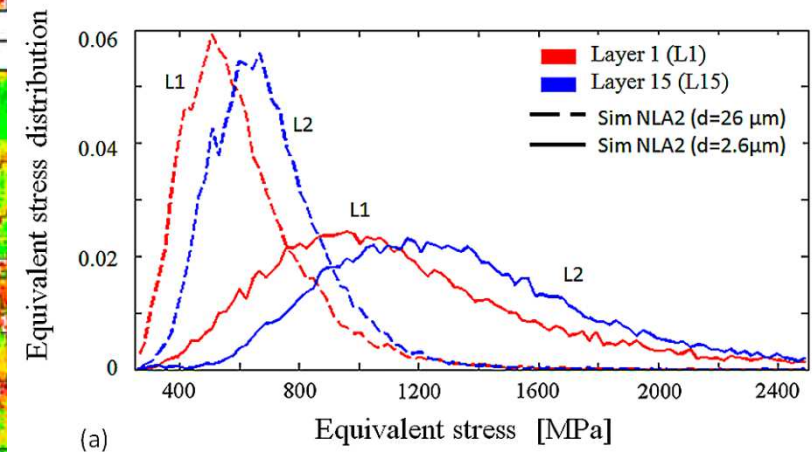
a-traction simple  
b-fatigue oligocyclique

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

## Contraintes de von Mises

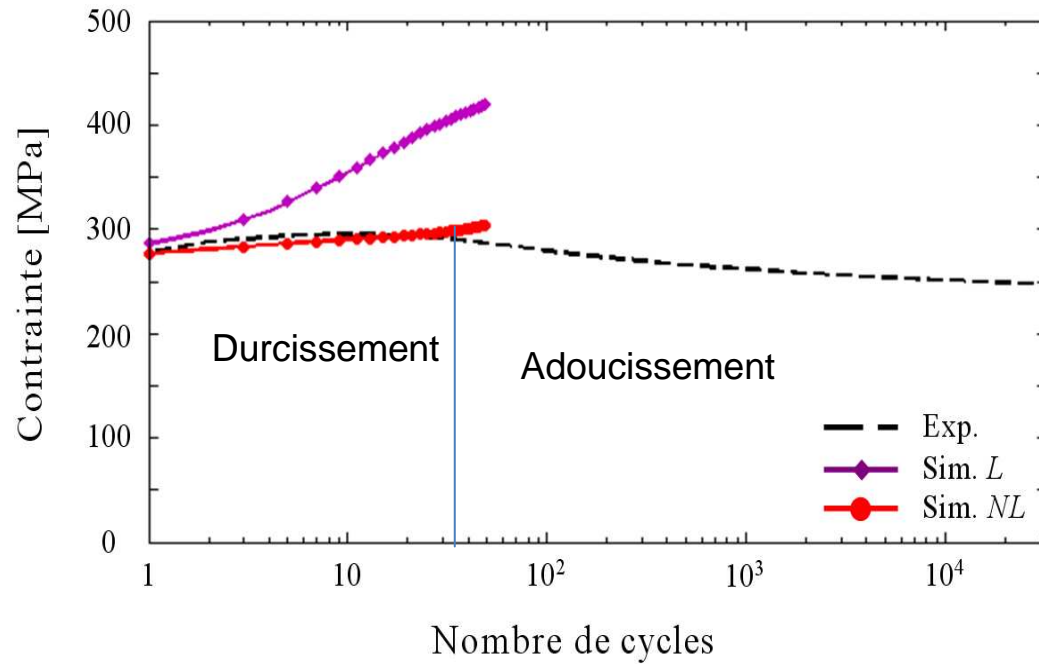


Courbes de traction macroscopiques obtenues avec « agrégat réel » identiques à Expérience et Identification



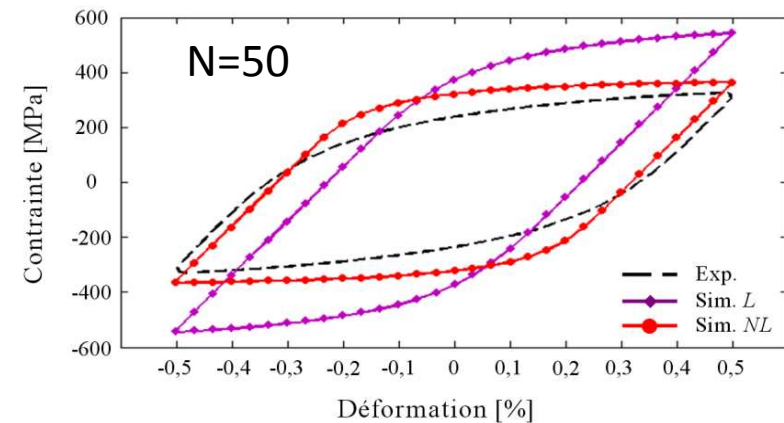
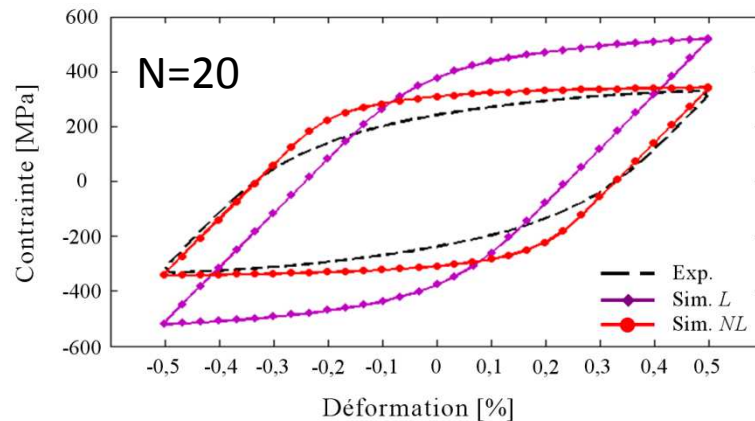
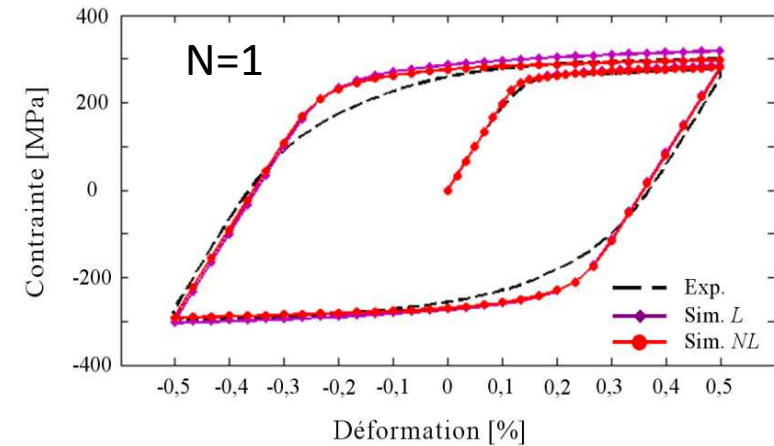


# Fatigue : Comparaison des approches L et NL (courbes macroscopiques)

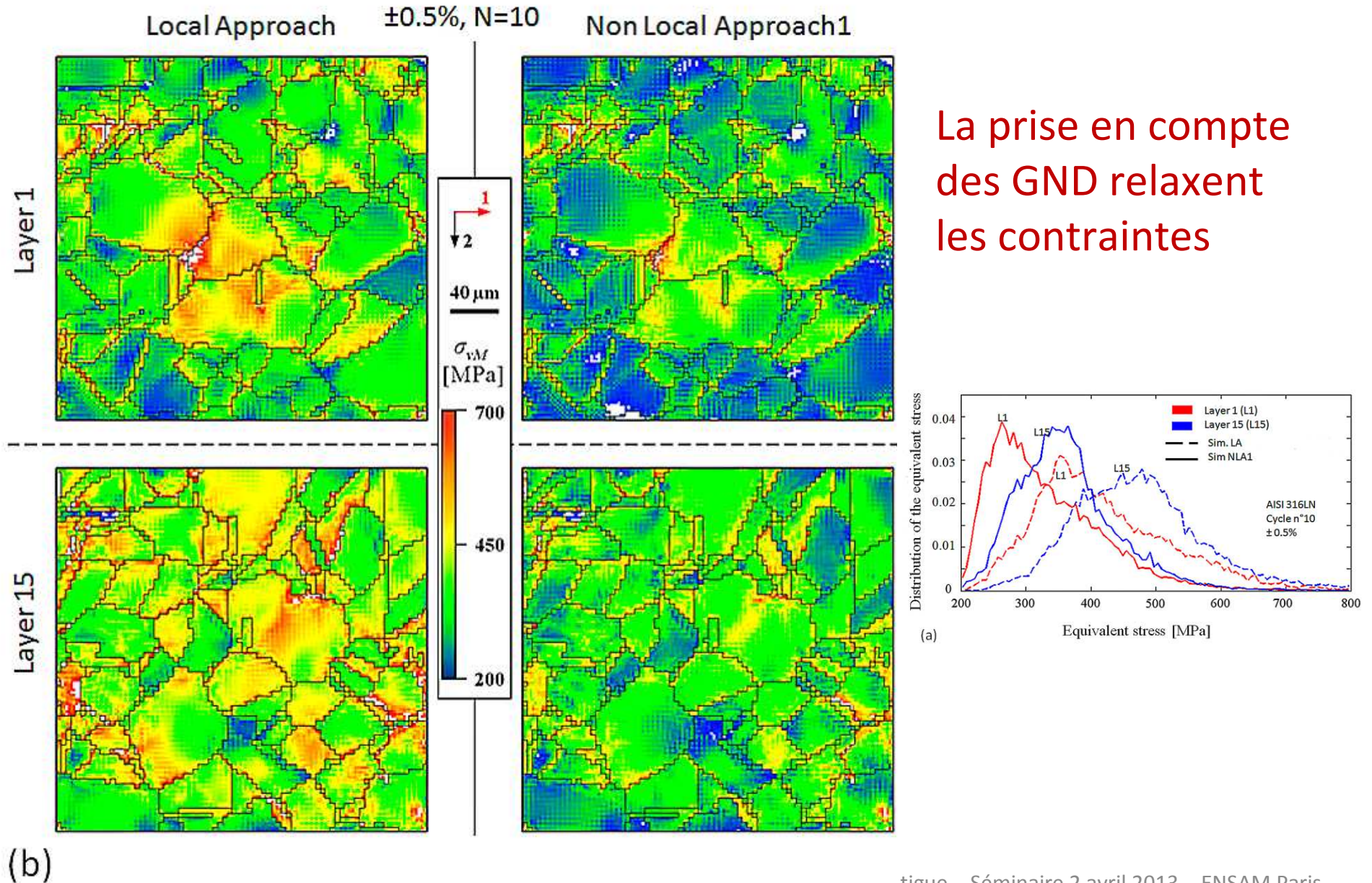


Très bonne description du durcissement cyclique

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



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





## RÉSULTATS

### 2- Effet de la taille de grains

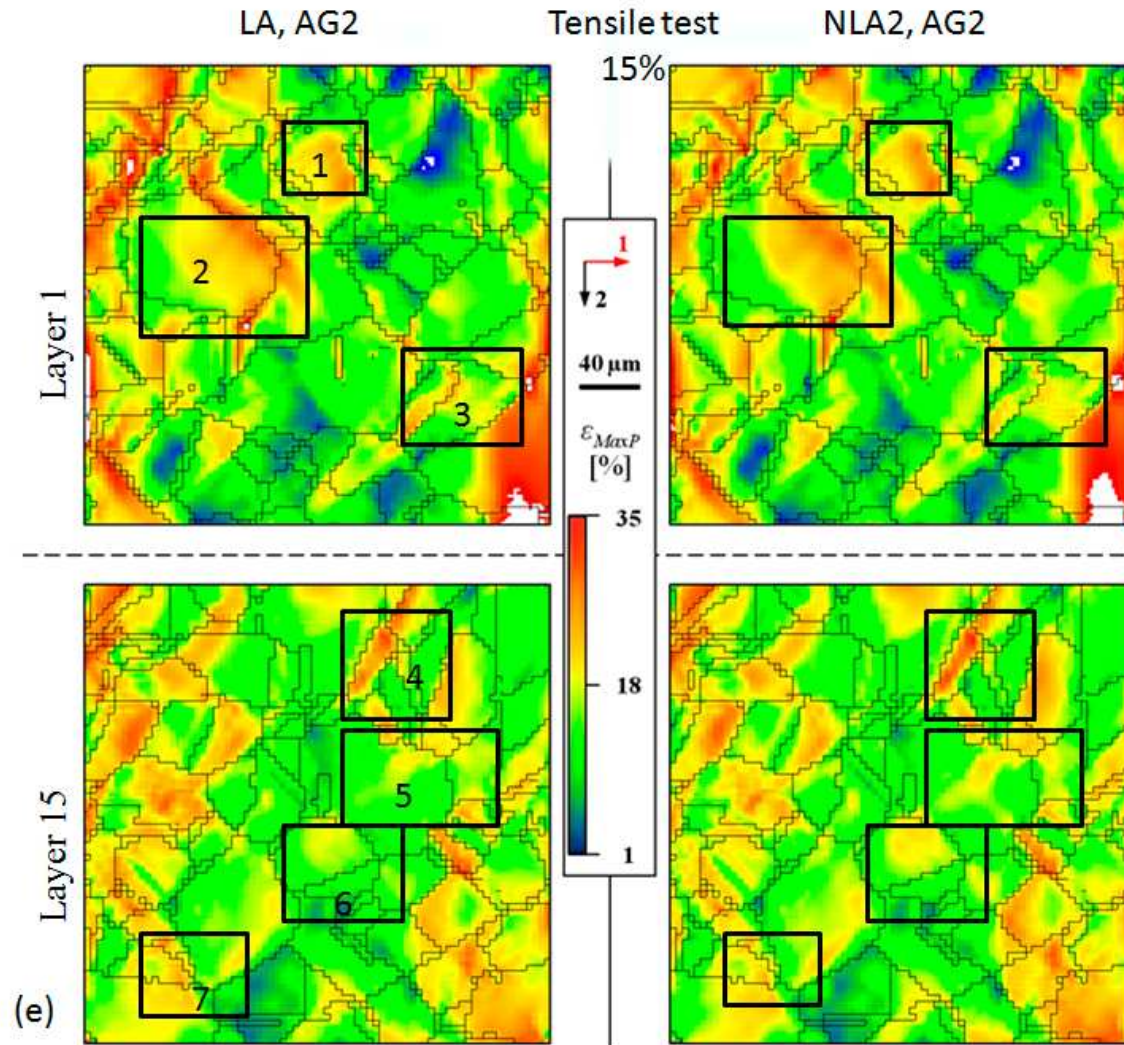
a-traction simple

b-fatigue oligocyclique

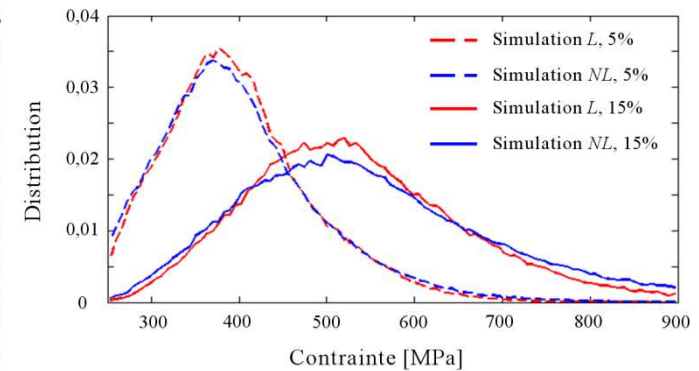


# Traction simple : Comparaison des approches L et NL ( $\epsilon > 1\%$ )

## Déformation principale maximale



Faibles différences

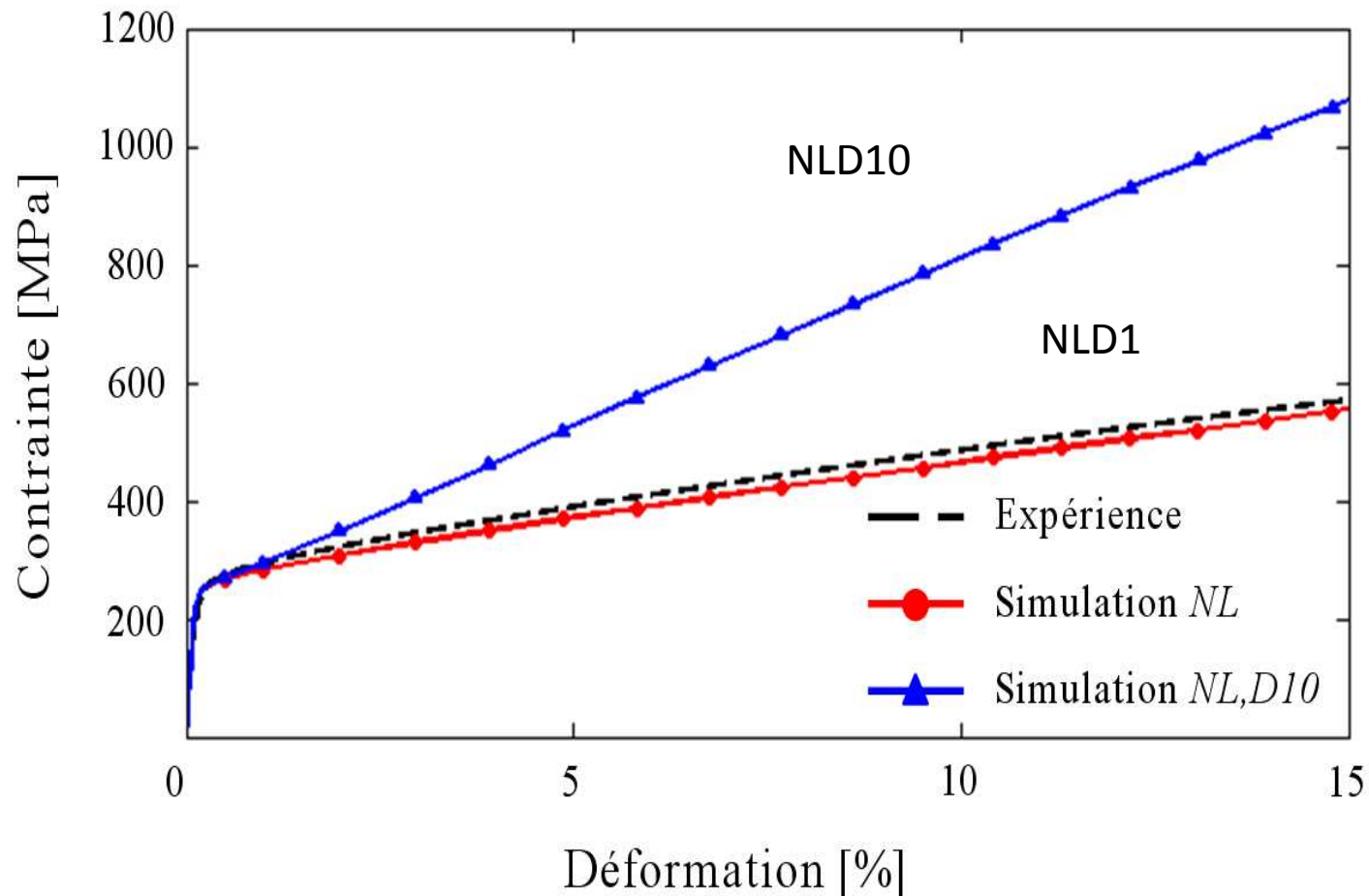


# Traction simple : Effet de taille de grains (NL $\epsilon > 1\%$ )

Traction suivant l'axe 1

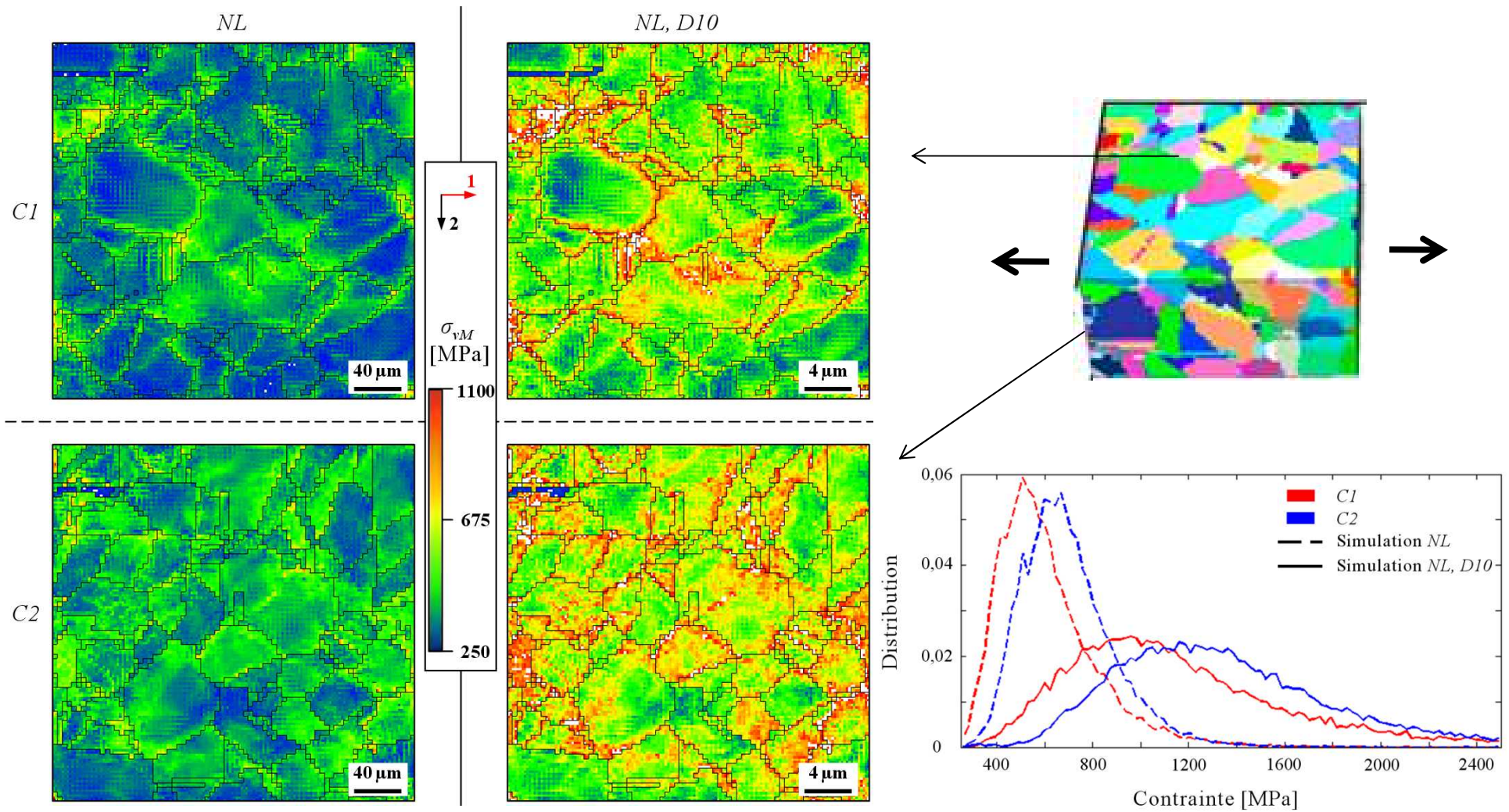
Agrégat NLD1 ( $d=27\mu\text{m}$ ) maillage cubique (C3D8) de  $4\mu\text{m}$

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



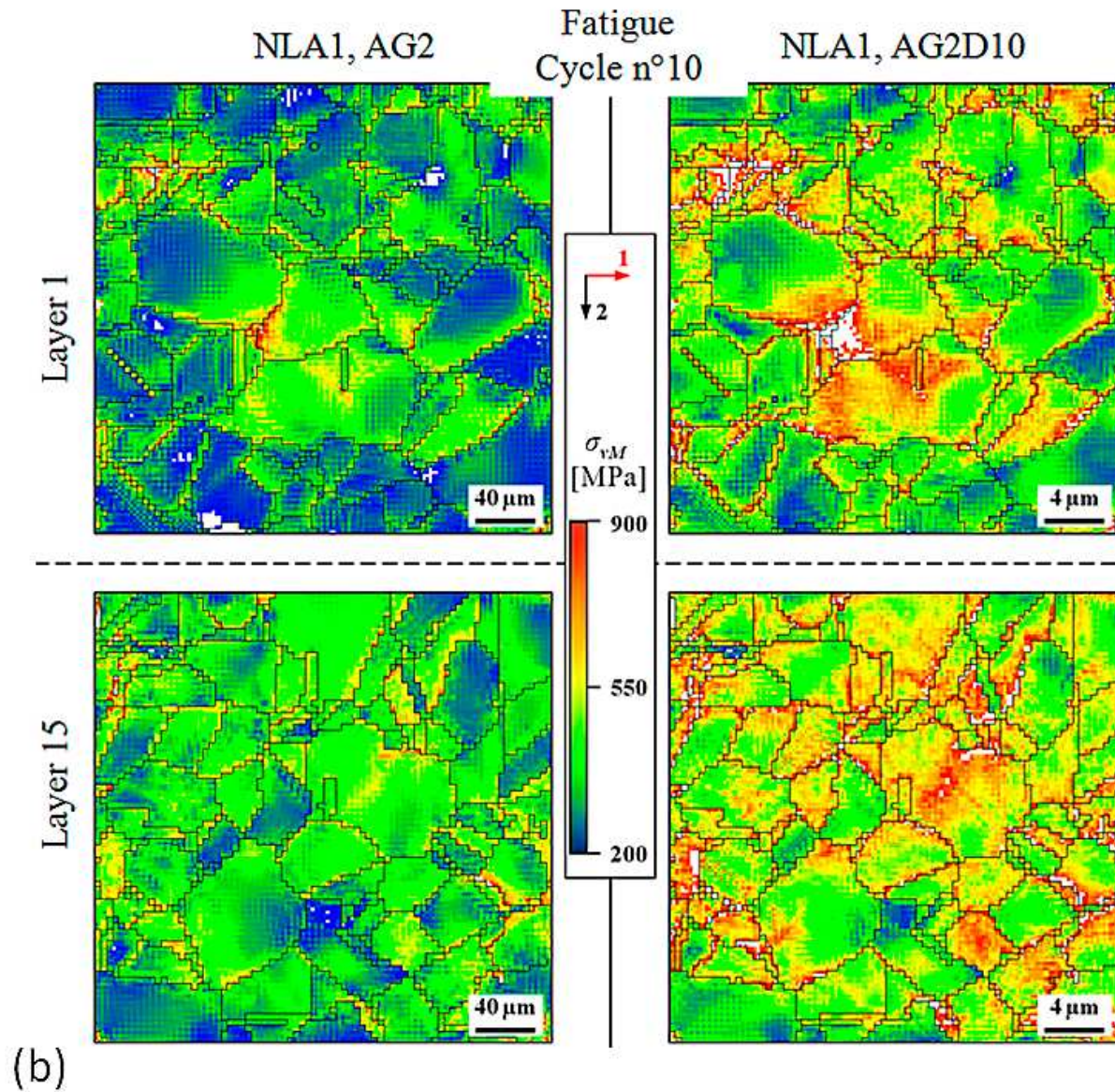


# Traction simple : Effet de taille de grains (NL $\epsilon > 1\%$ )

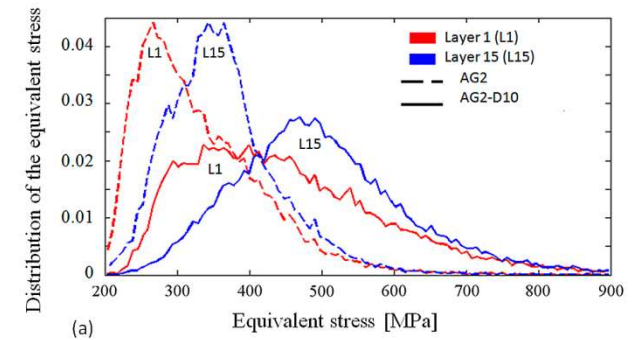




# Fatigue : Effet de taille de grains (NL $\epsilon < 1\%$ )



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)