

## **Modélisation du comportement des matériaux cubiques : prise en compte des hétérogénéités intragranulaires avec une approche élastoplastique à double transitions d'échelles**

J. Fajoui

GeM - Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, Université de Nantes - Ecole Centrale de Nantes - CNRS UMR 6183, 37 Boulevard de l'Université, BP 406, 44 602 Saint-Nazaire, France, jamal.fajoui@univ-nantes.fr

D. Gloaguen

GeM - Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, Université de Nantes - Ecole Centrale de Nantes - CNRS UMR 6183, 37 Boulevard de l'Université, BP 406, 44 602 Saint-Nazaire, France

B. Courant

GeM - Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, Université de Nantes - Ecole Centrale de Nantes - CNRS UMR 6183, 37 Boulevard de l'Université, BP 406, 44 602 Saint-Nazaire, France

R. Guillén

GeM - Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, Université de Nantes - Ecole Centrale de Nantes - CNRS UMR 6183, 37 Boulevard de l'Université, BP 406, 44 602 Saint-Nazaire, France

### **Résumé**

Du fait de l'optimisation des structures, la mise en forme des matériaux nécessite des trajets de chargements dits complexes avec une sollicitation pouvant évoluer continûment lors du chargement. Ces processus, très contraignants pour le matériau, sont limités par l'apparition et le développement d'instabilités plastiques et/ou d'endommagement. Les approches mécaniques déductives basées sur des transitions d'échelles constituent des outils de compréhension pertinents. Nous avons développé des modèles à double transition d'échelles (de la cellule au grain et du grain au polycristal) qui ont permis de rendre compte du comportement réel des matériaux lors de chargements complexes (effet Bauschinger). Cette double transition d'échelles a été assurée par deux schémas : Kröner ou Mori-Tanaka. L'hétérogénéisation intragranulaire est mise en évidence par un écrouissage non local, qui est représenté dans le cas d'une description biphasée de la structure cellulaire de dislocations. Des résultats numériques et expérimentaux (essais mécaniques, diffraction des rayons X) satisfaisants ont été obtenus sur des matériaux de symétrie cubique (Al6060, Fe $\alpha$ ).

### **Abstract**

Metal forming may often involve intense forming sequences, leading to large strains and severe strain path changes. These processes, very constraining for material, are limited by the appearance and the development of plastic instabilities and/or damage. Deductive methods based on strain mechanisms and scale transitions constitute relevant tools for a better comprehension. Two-level homogenization approaches are developed for the micromechanical modelling of the elastoplastic material behaviour. (Bauschinger effect). At the microscopic level, the mechanical behaviour is described by different scale transition models like Kröner or Mori-Tanaka approaches. The intragranular heterogeneities are highlighted by a non-local work-hardening, which is linked to a two-phase description. Correct agreement is observed between numerical and experiments results (mechanical tests, X-ray diffraction) obtained for cubic materials (Al6060, Fe $\alpha$ ).

## 1. INTRODUCTION

La microstructure de dislocations est considérée comme un matériau biphasé [1]. Les murs, aussi appelés parois, à forte densité de dislocations et de fraction volumique  $f_w$  (w pour «walls»), constituent une phase dure. L'intérieur des cellules, à faible densité de dislocations et de fraction volumique  $f_c=1-f_w$  (c pour «cells»), constitue une phase molle du point de vue mécanique. Dans un premier temps, la loi de comportement pour le milieu composite tient compte des différents phénomènes intragranulaires [2]. Ensuite, pour la détermination du comportement global du grain, il est nécessaire d'effectuer une transition d'échelle (micro-mésoscopique). A cet effet, deux formalismes sont proposés : le modèle de Kröner et le modèle de Mori-Tanaka. La transition d'échelle du grain au polycristal (mésomacroscopique) est ensuite mise en œuvre par l'intermédiaire du modèle classique autocohérent (figure 1).

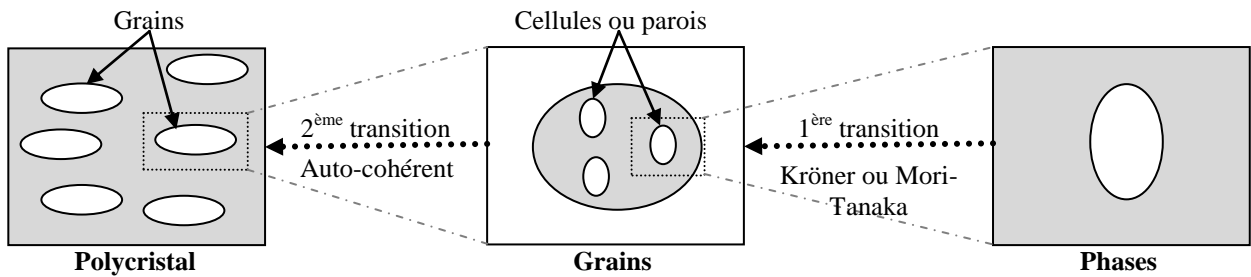


Figure 1 : schématisation de l'approche à double transitions d'échelles

## 2. MODELISATION DU COMPORTEMENT MECANIQUE

### 2.1. Modélisation du comportement du grain

#### 2.1.1. Modèle de Kröner

L'élasticité du grain est supposée homogène et isotrope dans le composite et elle est représentée par le tenseur d'élasticité  $c$ . La déformation d'ordre deux (II) au niveau du grain  $\varepsilon^{\text{II}}$  (avec une contrainte  $\sigma^{\text{II}}$ ) est composée par la déformation élastique ( $\varepsilon^{\text{el}}$ ) et la déformation plastique ( $\varepsilon^{\text{pl}}$ ). Dans le cas d'une élasticité isotrope, les relations de moyenne sur les déformations et les contraintes peuvent s'écrire :

$$\varepsilon^{\text{II}} = (1-f)\varepsilon^w + f\varepsilon^c \quad \text{et} \quad \sigma^{\text{II}} = (1-f)\sigma^w + f\sigma^c \quad (1)$$

$$\varepsilon^{\text{plII}} = (1-f)\varepsilon^{\text{plw}} + f\varepsilon^{\text{plc}} \quad (2)$$

$\varepsilon^w$  ( $\sigma^w$ ) et  $\varepsilon^c$  ( $\sigma^c$ ) sont les déformations (contraintes) moyennes dans les parois et les cellules,  $f$  est la fraction volumique des cellules. Les contraintes dans chaque phase s'expriment par :

$$\sigma^w = \sigma^{\text{II}} + a^w : (\varepsilon^{\text{plw}} - \varepsilon^{\text{plc}}) \quad \text{et} \quad \sigma^c = \sigma^{\text{II}} + a^c : (\varepsilon^{\text{plw}} - \varepsilon^{\text{plc}}) \quad (3)$$

où  $a^\alpha$  sont les tenseurs de localisation donnés par :

$$a^c = \alpha_T (1-f)c : (I - s^{esh}) \quad \text{et} \quad a^w = -\alpha_T fc : (I - s^{esh}) \quad (4)$$

$s^{esh}$  est le tenseur d'Eshelby dépendant de la géométrie de l'inclusion et  $I$  désigne le tenseur identité d'ordre 4.  $\alpha_T$  est un facteur d'accommodation [3]. Il a été introduit afin d'assurer, de manière simplifiée, l'accommodation plastique autour de l'inclusion (cellule ou paroi). Pour le calcul du taux de glissement des phases, on utilise ici la formulation développée par Ben Zeneb et al. [4] étendue à un milieu biphasé :

$$\dot{\gamma}_\alpha^g = K_\alpha^g (\tau_{c\alpha}^g, \tau_\alpha^g) \dot{\tau}_\alpha^g \quad (5)$$

Les fonctions  $K_\alpha^g$  permettent de gérer la gestion des systèmes de glissement durant la déformation plastique. Leurs expressions dans le cas de deux phases sont de la forme :

$$K_\alpha^g = \frac{1}{\eta} \left[ \frac{1}{2} (1 + \tanh(\tau_\alpha^g)) \right] \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left( k \left( \frac{\tau_\alpha^g}{\tau_{c\alpha}^g} - 1 \right) \right) \right) \right] \left[ \frac{1}{2} (1 + \tanh(\dot{\tau}_\alpha^g)) \right] \quad (6)$$

$k$  est un paramètre numérique et  $\eta$  est un terme qui caractérise l'autoécrouissage.

Lors d'une déformation plastique, les dislocations se déplacent vers les parois et par conséquent leur densité augmente. Les parois deviennent, ainsi, de plus en plus rigides et leur limite élastique sera plus élevée que celle des cellules. Ce phénomène de durcissement d'une région provoqué par la déformation plastique d'une autre région s'appelle l'écrouissage non local [5]. Si on considère le grain comme un milieu homogène, l'évolution du taux de scission critique de chaque phase sur un système  $g$  est donnée par :

$$\dot{\tau}_{cc}^g = \sum_h H_{cc}^{gh} \dot{\gamma}_c^h + \sum_h H_{cw}^{gh} \dot{\gamma}_w^h \quad \text{et} \quad \dot{\tau}_{cw}^g = \sum_h H_{wc}^{gh} \dot{\gamma}_c^h + \sum_h H_{ww}^{gh} \dot{\gamma}_w^h \quad (7)$$

$H_{cc}^{gh}$  et  $H_{ww}^{gh}$  traduisent l'influence locale du système  $h$  sur le système  $g$  de la même phase.  $H_{wc}^{gh}$  et  $H_{cw}^{gh}$  désignent l'aspect non local de l'écrouissage et l'influence d'une phase sur l'autre. L'évolution et la quantité des dislocations à l'intérieur des cellules sont très faibles par rapport à celle des dislocations présentes dans les parois [6]. Le taux de dislocations dans les parois peut être donné par [7] :

$$\dot{\rho}_w^g = \frac{1}{bL^g} \dot{\gamma}_c^g - \frac{2y_c}{b} \rho_w^g \dot{\gamma}_w^g \quad (8)$$

où  $b$  représente la norme du vecteur de Burgers du matériau.  $L^g$  désigne le libre parcours moyen des dislocations dans les cellules sur le système  $g$ .

La scission critique pour chaque système et pour chaque phase ( $\tau_{c\alpha}^g$ ) est obtenue à l'aide de la densité de dislocations et de la matrice décrivant l'anisotropie des interactions entre les systèmes de glissement  $g$  et  $h$  ( $a^{gh}$ ) par [8] :

$$\tau_{c\alpha}^g = \tau_{c0\alpha}^g + \xi \mu b \sqrt{\sum_h a^{gh} \rho_w^h} \quad (9)$$

où  $\tau_{c0\alpha}^g$  est la scission critique initiale de la phase,  $\zeta$  est une constante qui dépend des interactions élastiques entre dislocations.  $\mu$  représente le module de cisaillement du matériau. En développant l'équation (9), on trouve les expressions des  $H_{wc}^{gh}$  et  $H_{ww}^{gh}$  sous les formes :

$$H_{wc}^{gh} = \frac{\xi^2 \mu^2 \mathbf{b}}{2(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g)} \mathbf{a}^{gh} \quad \text{et} \quad H_{ww}^{gh} = -\frac{y_c \xi^2 \mu^2 \mathbf{b}}{(\tau_{c\alpha}^g - \tau_{c0\alpha}^g)} \rho_w^h \mathbf{a}^{gh} \quad (10)$$

La densité de dislocations dans les cellules reste faible par rapport à celle au niveau des parois [6]. Par conséquent, le stockage des dislocations dans les cellules reste faible du fait du nombre peu élevé d'obstacles présents. Ainsi, il apparaît raisonnable de choisir une valeur faible pour  $H_{cc}^{gh}$ , ce qui traduit la faible augmentation de la densité de dislocations dans les cellules et une valeur nulle pour  $H_{cw}^{gh}$  pour négliger les effets non locaux des parois sur les cellules. Alors, on peut écrire les matrices  $H_{cc}^{gh}$  et  $H_{cw}^{gh}$  sous la forme simplifiée :

$$H_{cc}^{gh} = \frac{\zeta}{\tau_{cc}^g - \tau_{c0c}^g} \mathbf{a}^{gh} \quad \text{et} \quad H_{cw}^{gh} = 0 \quad (11)$$

où  $\zeta$  est une constante. Durant la plasticité, on considère que la fraction volumique  $f$  des cellules pour un grain  $I$  donné évolue en fonction du glissement accumulé  $\gamma_{cI}^{acc}$  à travers la relation empirique suivante [9] :

$$f = f(I) = f_\infty + (f_0 - f_\infty) \exp\left(-\frac{\gamma_{cI}^{acc}}{\gamma^{par}}\right) \quad (12)$$

où  $f_0$  est la fraction volumique initiale et  $f_\infty$  la valeur de saturation à grande déformation.  $\gamma^{par}$  est un paramètre qui définit la vitesse d'évolution de  $f$ .  $\gamma_{cI}^{acc}$  représente le glissement accumulé dans le grain  $I$ . Cette relation permet, de plus, de prendre en compte l'hétérogénéité intergranulaire.

Les scissions réduites dans les phases sont liées aux contraintes à travers le tenseur de Schmid  $R^{\alpha g}$  :

$$\dot{\tau}_c^g = \mathbf{R}^g : \dot{\sigma}^c \quad \text{et} \quad \dot{\tau}_w^g = \mathbf{R}^g : \dot{\sigma}^w \quad (13)$$

La déformation plastique pour chaque phase est donnée sous la forme :

$$\dot{\varepsilon}^{p\alpha} = \sum_h \mathbf{R}^h \dot{\gamma}_\alpha^h \quad (14)$$

En combinant les relations précédentes, nous trouvons une nouvelle expression du taux de glissement :

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_c^g \\ \dot{\gamma}_w^g \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{cc}^{gh} & \mathbf{M}_{cw}^{gh} \\ \mathbf{M}_{wc}^{gh} & \mathbf{M}_{ww}^{gh} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{K}_c^h \mathbf{R}^{ch} : \dot{\sigma}^{II} \\ \mathbf{K}_w^h \mathbf{R}^{wh} : \dot{\sigma}^{II} \end{pmatrix} \quad (15)$$

ou bien :

$$\dot{\gamma}_\alpha^g = \mathbf{T}_\alpha^g : \dot{\sigma}^{II} \quad (16)$$

avec :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{cc}^{gh} & \mathbf{M}_{cw}^{gh} \\ \mathbf{M}_{wc}^{gh} & \mathbf{M}_{ww}^{gh} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{gh} + \mathbf{K}_c^g \mathbf{R}_c^g : \mathbf{a}^c : \mathbf{R}_c^h & -\mathbf{K}_c^g \mathbf{R}_c^g : \mathbf{a}^c : \mathbf{R}_w^h \\ \mathbf{K}_w^g \mathbf{R}_w^g : \mathbf{a}^w : \mathbf{R}_c^h & \delta_{gh} - \mathbf{K}_w^g \mathbf{R}_w^g : \mathbf{a}^w : \mathbf{R}_w^h \end{bmatrix}^{-1} \quad (17)$$

$\delta_{gh}$  est le symbole de Kronecker.  $h$  et  $g$  varient de 1 à 24 pour une structure CFC et de 1 à 48 pour une structure CC. En développant l'équation 18, on peut trouver une expression condensée du taux de glissement sous la forme :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{II}} = \left[ \mathbf{s} + \sum_g \left( f \mathbf{R}_c^g : \mathbf{T}_c^g + (1-f) \mathbf{R}_w^g : \mathbf{T}_w^g \right) \right] : \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{II}} = \mathbf{I}^{-1} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{II}} \quad (18)$$

Finalement, les modules élastoplastiques tangents mésoscopiques sont donnés par :

$$\mathbf{I}^{-1} = \left[ \mathbf{s} + f \mathbf{R}_c^g : \mathbf{T}_c^g + (1-f) \mathbf{R}_w^g : \mathbf{T}_w^g \right] \quad (19)$$

Cette équation nous permet donc d'avoir le comportement élastoplastique supposé local en moyenne au niveau du grain à partir des caractéristiques non locales au niveau des cellules et parois de dislocations.

### 2.1.2. Modèle de Mori-Tanaka

Le modèle de Mori-Tanaka est basé sur la solution d'Eshelby [10] pour une inclusion plongée dans un milieu infini. Il est adapté à étudier les matériaux composites présentant une microstructure matrice - particule avec une fraction volumique modérée d'inclusions (parois).

Le taux de déformation dans l'inclusion (ici les parois) en fonction du taux de déformation dans la matrice (cellules) peut s'exprimer de la façon suivante :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^w = \mathbf{T} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c \quad \text{ou bien} \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{inclusion}} = \mathbf{T} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{matrice}} \quad (20)$$

avec :

$$\mathbf{T} = \left[ \mathbf{I} + \mathbf{s}^{\text{esh}} : \mathbf{I}^{-1} : (\mathbf{I}^{\text{ww}} - \mathbf{I}^{\text{cc}}) \right]^{-1} \quad (21)$$

$\mathbf{I}^{\alpha\beta}$  sont les modules élastoplastiques tangents microscopiques à l'échelle des phases.

Les relations de localisations entre les grains et les phases sont données par :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^\alpha = \mathbf{a}^\alpha : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{II}} \quad (22)$$

$\mathbf{a}^\alpha$  ( $\alpha=c, w$ ) sont les tenseur de localisation des cellules et des parois :

$$\mathbf{a}^c = [f\mathbf{I} + (1-f)\mathbf{T}]^{-1} \quad \text{et} \quad \mathbf{a}^w = \mathbf{T} : [f\mathbf{I} + (1-f)\mathbf{T}]^{-1} \quad (23)$$

Nous trouvons de nouvelles expressions des taux de glissements des phases :

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma}_c^g \\ \dot{\gamma}_w^g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{cc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{cw}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w \\ K_{wc}^h R_{ij}^{ch} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^c + K_{ww}^h R_{ij}^{wh} c_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^w \end{pmatrix} \quad (24)$$

avec :

$$\begin{pmatrix} M_{cc}^{gh} & M_{cw}^{gh} \\ M_{wc}^{gh} & M_{ww}^{gh} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_{gh} + K_{cc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} & K_{cw}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \\ K_{wc}^g R_{ij}^{cg} c_{ijkl} R_{kl}^{ch} & \delta_{gh} + K_{ww}^g R_{ij}^{wg} c_{ijkl} R_{kl}^{wh} \end{bmatrix}^{-1} \quad (25)$$

Ainsi, on pourra déduire des expressions des taux de contraintes des phases :

$$\dot{\sigma}^c = I^{cc} : \dot{\epsilon}^c + I^{cw} : \dot{\epsilon}^w \quad \text{et} \quad \dot{\sigma}^w = I^{wc} : \dot{\epsilon}^c + I^{ww} : \dot{\epsilon}^w \quad (26)$$

Nous trouvons les expressions des modules tangents microscopiques sous la forme :

$$\begin{cases} I_{ijkl}^{cc} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ I_{ijkl}^{cw} = -c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{cg} M_{cw}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \\ I_{ijkl}^{wc} = -c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{wc}^h R_{tu}^{ch} c_{tukl} \\ I_{ijkl}^{ww} = c_{ijkl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{wc}^{gh} K_{cw}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} - c_{ijmn} R_{mn}^{wg} M_{ww}^{gh} K_{ww}^h R_{tu}^{wh} c_{tukl} \end{cases} \quad (27)$$

Ces modules tangents microscopiques permettent d'exprimer l'écroissage non local induit par la déformation plastique à l'intérieur des cellules qui entraîne un durcissement des parois. Ils dépendent des matrices d'écroissages locales et non locales par conséquent en fonction des paramètres internes.

## 2.2. Modélisation du comportement du polycristal

Dans la partie précédente nous avons développé deux approches pour décrire le comportement du grain en utilisant le modèle de Kröner (Kr) et de Mori-Tanaka (MT) et en tenant compte de la microstructure de dislocations et des effets non locaux au niveau des cellules. Une autre transition vers l'échelle macroscopique permettra d'analyser l'influence des hétérogénéités intragranulaires sur le comportement global du matériau. Un schéma autocohérent classique (SC) à un site est alors utilisé pour effectuer la transition depuis l'échelle mésoscopique (grain) jusqu'au niveau du polycristal (macroscopique). L'ajout principal est la loi de comportement mésoscopique résultant des propriétés non locales de la structure cellulaire permettant d'accéder aux grandeurs aux trois échelles du matériau. Pour plus de détails sur ce schéma, le lecteur pourra se référer à [11] par exemple. Par soucis de simplification, dans le cadre d'une première approche, nous supposons que la décharge est purement élastique sans écoulement plastique.

## 3. RESULTATS NUMERIQUES

Pour valider nos modèles, nous avons effectué plusieurs confrontations entre les simulations et des résultats expérimentaux à différentes échelles : comportement mécanique macroscopique, déformations résiduelles obtenues par diffraction des rayons X, comportement mécanique de

monocristaux. Nous avons réalisé certains essais au sein du laboratoire GeM. Dans cet article, nous présentons seulement quelques exemples de nos résultats pour illustrer les approches mises en place.

### 3.1. Validation du modèle Mori-Tanaka-Autocohérent (MT-SC)

Keh et Nakada [12] ont réalisé des essais de cisaillement complexes sur des éprouvettes monocristallines de fer- $\alpha$ . Nous avons simulé plusieurs orientations correspondant à celles des monocristaux étudiés par les auteurs. Les paramètres de simulations ont été déterminés par un essai de calage et ils sont regroupés dans le tableau 1. Dans le cadre du modèle MT-SC, nous avons fixé une fraction volumique des parois proche de 0,1 pour rester dans le cadre d'un milieu dilué. Deux exemples de courbes expérimentales et simulées sont donnés dans la figure 2. Le modèle de Mori-Tanaka permet de reproduire de manière réaliste l'augmentation de la limite d'élasticité entre les deux chargements du fait de la prise en compte des contraintes cinématiques au niveau de la microstructure. Ce modèle est donc capable de reproduire et d'expliquer le comportement de monocristaux sous chargements monotones ou bien complexes.

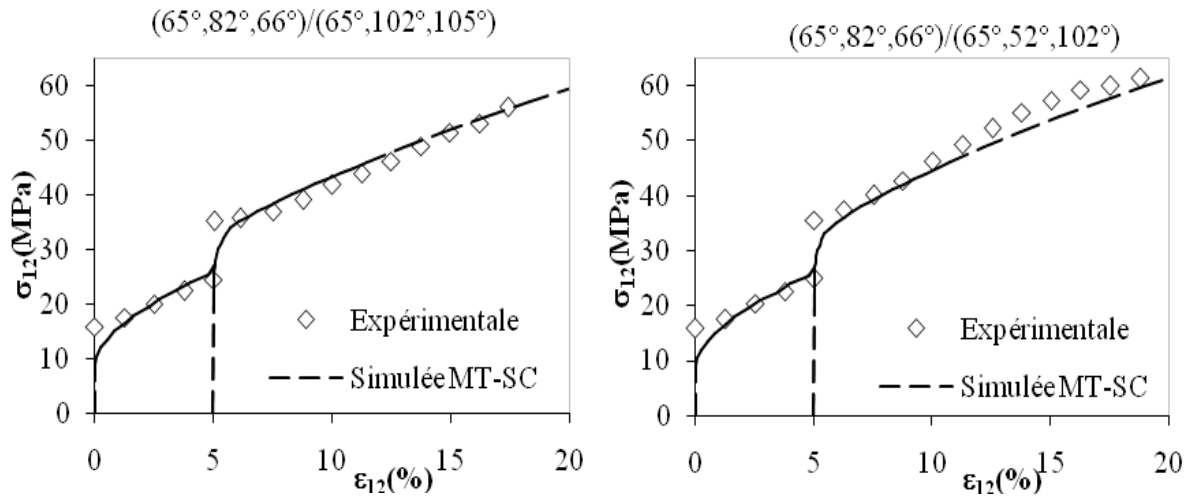


Figure 2 : résultats expérimentaux [12] et simulés pour des essais de cisaillement complexes

$a^{gg}$	$a^{gh}$	$\tau_{c0(112)}(MPa)$	$\tau_{c0(110)}(MPa)$	$\zeta(MPa^2)$	$f_0$	$f_\infty$	$\gamma^{par}$	$\xi$	$k$
1	1,1	6	5	400	0,9	0,75	3,2	0,6	10

Tableau 1 : paramètres des simulations

$a^{gg}$	$a^{gh}$	$f_\infty$	$\gamma^{par}$	$k$	$\zeta(MPa^2)$	$\rho_0(m^{-2})$	$y_c(m^{-2})$	$\tau_{c0}(MPa)$
1	1,1	0,75	3,2	2	400	$5 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-9}$	76

Tableau 2 : paramètres d'ajustement pour le modèle Kr-SC

### 3.2. Validation du modèle Kröner-Autocohérent (Kr-SC)

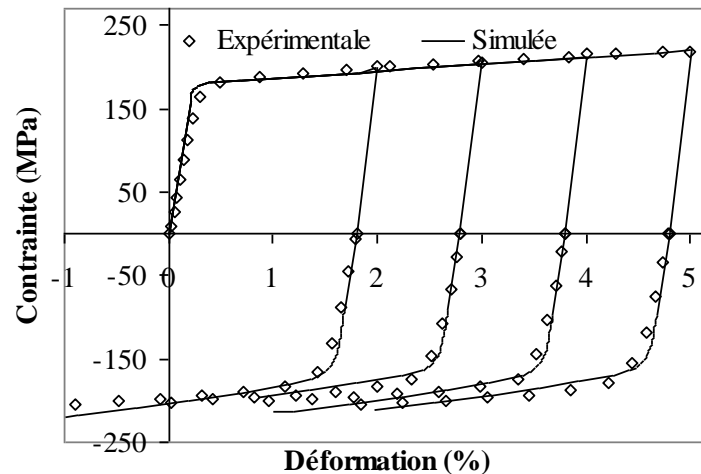
Des essais complexes (traction-compression) ont été réalisés sur un alliage d'aluminium 6061. Suite à ces essais, des analyses de contraintes par diffraction X [13] ont été effectuées. Pour la détermination

des paramètres du modèle, nous avons seulement utilisé un essai mécanique en chargement monotone (traction) comme essai de référence. Ensuite, pour les autres essais (chargements complexes et résultats de diffraction), le jeu de paramètres reste évidemment identique.

Les paramètres du modèle sont ajustés pour reproduire au mieux les données expérimentales relatives à l'essai de traction (tableau 2).

A partir de la FDO expérimentale, nous avons sélectionné 1000 orientations représentatives de la texture effective du matériau. Les courbes de traction-compression simulées avec le modèle Kr-SC sont présentées sur la figure 3.

Le modèle de Kr-SC arrive à reproduire le comportement de l'aluminium pour des trajets complexes. Pour les chargements en compression, il conduit à de légères différences avec les données expérimentales dans la partie plastique (écart relatif de 6 % à -0,4 % de déformation totale).

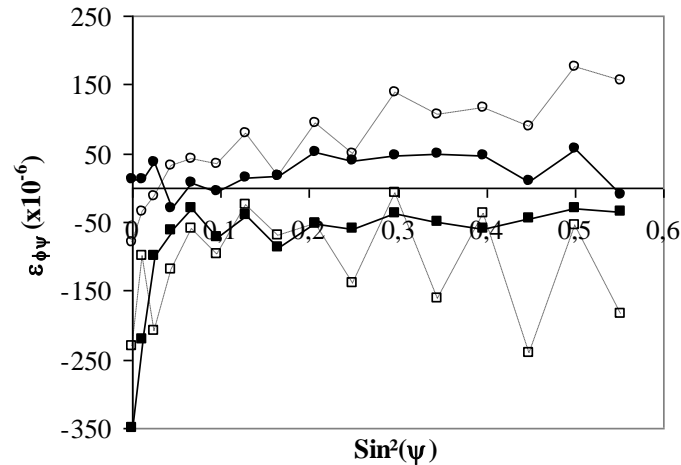


**Figure 3** : courbes contrainte-déformation macroscopiques expérimentales et simulées

La projection des déformations d'ordre II calculées après la décharge élastique sur les directions de mesure  $(\phi, \psi)$  pour un plan cristallin donné, nous permet alors de simuler les courbes  $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ . Les résultats prédits sont ensuite comparés aux mesures expérimentales afin d'établir leur validité et de discuter et interpréter la distribution des déformations déduites.

La figure 4 présente l'évolution simulée des courbes  $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$  dans la direction longitudinale pour les plans (311) et (422) pour des déformations totales de 2 et 5 % après un chargement en traction. On constate une correspondance entre l'expérience et la simulation. Les valeurs de déformations sont du même ordre de grandeur. En revanche, les courbes expérimentales présentent des oscillations plus marquées que les courbes simulées. Dans les deux cas, les pentes ont sensiblement la même valeur. Les déformations résiduelles engendrées par la traction restent faibles. Le modèle capture le niveau et le signe des déformations résiduelles expérimentales qui sont différents pour les deux plans présentés. Une analyse similaire a été effectuée pour les essais complexes. Les simulations arrivent à reproduire correctement pour les différents plans analysés et les différentes directions de mesure les variations des déformations résiduelles lors des changements de trajet à l'échelle, plus sélective, du volume diffractant.





**Figure 4** : comparaison des courbes  $\langle \varepsilon(\phi, \psi, hkl) \rangle_{\psi_0} = f(\sin^2\psi)$  mesurées et calculées dans la direction longitudinale ( $\phi = 0^\circ$ ) pour le plan (311) et (422) après le premier chargement

○ : 2 % de déformation – expérience ; ● : 2 % de déformation – simulation (plan (311))

□ : 5 % de déformation – expérience ; ■ : 5 % de déformation – simulation (plan (422))

#### 4. CONCLUSION

Nous avons présenté deux approches avec une double transition d'échelles élastoplastique des matériaux de structure cubique afin de tenir compte de l'hétérogénéité intragranulaire. Dans la première approche, la première transition a été assurée par le modèle de Kröner pour déduire le comportement du grain de ceux des phases (cellules et parois) et la deuxième par le modèle autocohérent afin de simuler le comportement du polycristal à partir de celui des grains. La deuxième approche est assurée par le modèle Mori-Tanaka et le modèle autocohérent. Elle a permis de réduire le temps de calcul notamment au niveau du tenseur du module tangent des grains. Nous avons simulé le comportement de monocristaux et de polycristaux ayant subi des chargements monotones et séquentiels pour vérifier la cohérence des approches mises en place. A l'échelle du volume diffractant, les simulations numériques effectuées avec le modèle Kr-SC sont en bon accord avec les données expérimentales obtenues par diffraction.

#### 5. RÉFÉRENCES

- 1 Mughrabi H., The long-range internal stress field in the dislocation wall structure of persistent slip bands, *Phys. Stat. Sol. (a)*, Vol. 104, pp. 107-120, 1987.
- 2 David F., Aubert I., Lemoine X., Berveiller M., Modelling of elastoplastic polycrystals and aspects of applications, *Comp. Mat. Sc.*, Vol. 9, pp. 188-198, 1997.
- 3 Berveiller M., Zaoui A., An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. 26, pp. 325-344, 1979.
- 4 Ben Zineb T., Arbab Chirani S., Berveiller M., Nouvelle formulation de la plasticité cristalline utilisant une contrainte de référence avec écrouissage, XV<sup>ème</sup> Congrès Français de Mécanique, Nancy, 2001.
- 5 Muller D., Lemoine X., Berveiller M., Nonlocal behavior of elastoplastic metals: theory and results, *J. Eng. Mat. Tech.*, Vol. 116, pp. 378-383, 1994.

- 6 Mughrabi H., Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals, *Acta Meta.* Vol. 31, pp. 1367-1379, 1983.
- 7 Essmann U., Mughrabi H., Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities, *Phil. Mag.* Vol. 40, pp. 731-756, 1979.
- 8 Franciosi P., The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals., *Acta Metall.*, Vol. 33, pp. 1601-1612, 1985.
- 9 Fajoui J., Gloaguen D., Courant B., Guillén R., Micromechanical modelling of the elastoplastic behaviour of metallic material under strain-path changes, *Comp. Mech.* pp. 44:285–296, 2009.
- 10 Eshelby J. D., The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems, *Proc. R. Soc. Lond.* Vol. A 241, pp. 376-396, 1957.
- 11 Lipinski P., Krier J., Berveiller M., Elastoplasticité des métaux en grandes déformations : comportement global et évolution de la structure interne, *Rev. Phys. Appl.*, Vol. 25, pp. 361-388, 1990.
- 12 Keh A. S., Nakada Y., Plasticity of iron single crystals, *Canadian J. Phy.*, Vol. 45, pp. 1101-1120, 1967.
- 13 Gloaguen D., François M., Guillén R., Mesoscopic residual stresses of plastic origin in zirconium: interpretation of X-ray diffractions results, *J. App. Cryst.*, 37, pp. 934-940, 2004.