

## ***Modèles discrets et continus de la plasticité des métaux : du monocristal au polycristal*** ***Samuel FOREST et Marc FIVEL***

### ***V.1 - Modélisation de la dynamique des dislocations***

Bien que le comportement individuel des dislocations soit relativement bien maîtrisé depuis les années soixante [1], notamment dans le cadre de matériaux de structure cubique à faces centrées, il reste aujourd'hui bon nombre d'incertitudes quant au comportement collectif d'une population de dislocations et son influence sur la réponse mécanique du matériau. Ces constatations, aidées par la puissance toujours croissante des ordinateurs ont motivé le développement de simulations numériques. Ainsi, dès la fin des années quatre-vingt, les premiers codes simulant en deux dimensions le comportement dynamique de populations de dislocations ont vu le jour [2-4]. Parfaitement adaptés pour étudier certains mécanismes fondamentaux tels que les arrangements de dislocations ou la localisation de la déformation, ces codes sont limités par leur caractère bi-dimensionnel qui ne peut pas rendre compte du glissement dévié, de l'effet de la tension de ligne ou encore de la formation de jonctions et des conditions de glissement multiple. Le premier code tri-dimensionnel [5] est volontairement fondé sur une discrétisation simplifiée de l'espace et des lignes de dislocations afin de réduire les temps de calcul. Plus récemment, plusieurs équipes ont commencé à développer leur propre code numérique en améliorant notamment la description des lignes de dislocations (code discret de Hirth [6], descriptions nodales dans [7,8], interpolation Spline dans [9]...). On présente ici un code discret dérivé du modèle de Kubin et Canova [10]. Après avoir rapidement décrit les fondements du modèle, on présente deux applications.

#### ***V.1.1 - Présentation du modèle discret***

Le modèle discret, dit modèle 'vis-coin', est fondé sur une discrétisation des lignes de dislocations en segments de caractère vis et coin uniquement. Ainsi, une boucle de Frank est modélisée par une succession de segments orthogonaux les uns aux autres. L'espace est également discrétisé en un ensemble de noeuds situés sur un maillage homothétique de la structure cubique à faces centrées, avec un paramètre de maille de l'ordre de  $10b$ . Enfin, le temps est également discrétisé en pas de l'ordre

de  $10^{-11}$  à  $10^{-9}$  s. Sur chaque segment de dislocation, on calcule la contrainte de cisaillement,  $\tau^*$ , résolue sur le plan de glissement correspondant. Cette contrainte effective provient de plusieurs contributions :

$$\tau^* = \tau_{app} + \tau_{int} + \tau_{im} + \tau_{ll} - \tau_{fr} \quad (1)$$

où  $\tau_{app}$  est la projection du tenseur des contraintes appliquées (provenant du chargement imposé),  $\tau_{int}$  est la contrainte interne générée par tous les segments de dislocation contenus dans la boîte de simulation,  $\tau_{im}$  est la cisssion résolue provenant des effets des conditions aux limites (forces images) calculée par éléments finis,  $\tau_{ll}$  est la tension de ligne calculée entre le segment considéré et ses deux voisins immédiats et  $\tau_{fr}$  est la friction de réseau. La vitesse d'un segment de dislocation est déterminée par la relation :  $\mathbf{v} = \frac{\tau^* b}{B} \mathbf{d}_g$ , où  $\mathbf{d}_g$  est le vecteur unitaire donnant la direction de vol du segment : direction coin pour un segment vis et inversement. L'algorithme utilisé consiste à chaque pas de temps à calculer l'ensemble des champs de vitesses pour tous les segments de dislocations, puis à déplacer les segments sur une distance de vol  $d = v \cdot \delta t$ . Les obstacles que chaque segment peut rencontrer durant son vol sont gérés individuellement et les lignes de dislocations sont reconnectées si nécessaire.

### ***V.1.2 - Simulation d'un essai de nanoindentation***

Le code de dynamique des dislocations est utilisé pour simuler un essai de nanoindentation de 50 nm suivant la direction [100] d'un monocristal de cuivre. L'expérience correspondante a été menée avec un indenteur de type Berkovitch de rayon de pointe 300 nm [11]. A une profondeur de 50 nm, les trois faces du Berkovitch ne pénètrent pas la surface. On peut donc assimiler l'indenteur à une sphère de rayon 300 nm. Informatiquement, le contact est modélisé par l'application d'une pression de Hertz appliquée sur la surface supérieure d'un cube de 4 microns de côté. Un critère de nucléation de dislocations sous l'indenteur est utilisé. Fondé sur les observations expérimentales, ce critère consiste à introduire des petites boucles prismatiques sur les systèmes activés par le chargement et placées à l'endroit de cisaillement maximal. A chaque incrément du chargement appliqué, ces petites boucles sont introduites jusqu'à ce que la force sur l'indenteur soit celle mesurée expérimentalement. Le chargement est appliqué de manière quasi-statique : il n'est incrémenté qu'après que les dislocations ont toutes atteintes une position d'équilibre. La microstructure numérique générée à 50 nm de profondeur est donnée figure 1(a). Afin de comparer ces résultats avec les observations MET, nous avons ensuite simulé la décharge ainsi que les opérations de découpe de la lame mince. La décharge est simulée en retirant le chargement et en résolvant le problème où seules des forces images sont appliquées sur la surface indentée. La découpe de la lame mince est modélisée en ne conservant que les segments des 250 nm supérieurs de la figure 1(a) et en appliquant ensuite des forces images sur les deux surfaces libres du volume ainsi réduit. La microstructure obtenue après ces deux étapes est représentée sur la figure 1(b). On constate que le volume plastifié correspond à une demi-sphère de rayon de l'ordre de 700 nm

ce qui correspond aux observations MET. De plus, il est possible d'estimer grossièrement la dureté du matériau à partir de la densité de dislocations contenues dans la demi-sphère. En effet, si l'on suppose que la contrainte d'écoulement est donnée par  $\tau_y = \sigma_y/2 = \alpha\mu b\sqrt{\rho}$  avec  $\alpha \simeq 0.3$  et que la dureté est proche de  $H = 3\sigma_y$ , on trouve une dureté du monocristal de cuivre  $H=1.5\text{GPa}$  ce qui est en accord avec les mesures expérimentales ( $H = 1.4 \pm 0.2\text{GPa}$ ).

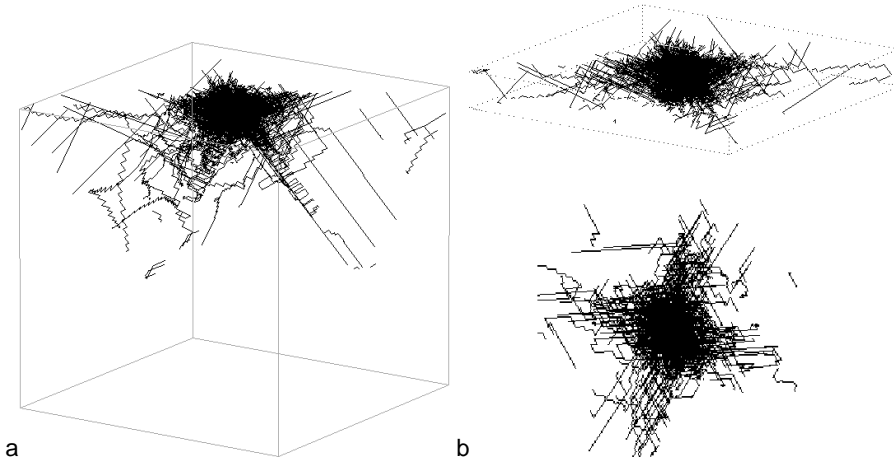


Figure 1 - Simulation de l'essai de nanoindentation d'un monocristal de cuivre [11].  
 a - Microstructure obtenue après une indentation à 50 nm suivant (100).  
 b - Microstructure finale après décharge et découpe de la lame mince.

### V.1.3 - Détermination de paramètres d'une loi de comportement

Le code de simulation de la dynamique des dislocations est maintenant utilisé pour identifier la valeur de plusieurs paramètres intervenant dans des relations de comportement de milieu continu. Pour cette étude nous considérons les lois de comportement à variables internes issues de [12]. Ce modèle, qui sera rappelé dans la partie V.3, repose sur trois relations : une loi d'écoulement, une loi d'écrouissage reliant la contrainte  $\tau_c^s$  aux densités de dislocations sur tous les systèmes de glissement  $\rho^r$ , et une loi d'évolution des densités de dislocations sur chaque système :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \left( \frac{|\tau^s|}{\tau_c^s} \right)^{1/m}, \quad \tau_c^s = \mu b \sqrt{\sum_r a^{sr} \rho^r}, \quad \dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left( \frac{\sqrt{\sum_r d^{sr} \rho^r}}{K} - 2y_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s| \quad (2)$$

Bien que chacune de ces trois lois soit déduite de phénomènes physiques locaux tels que la théorie de l'activation thermique, il est difficile d'établir la valeur numérique à donner aux paramètres impliqués dans les relations. Il est alors nécessaire de

les identifier, en utilisant une méthode inverse, ou en réalisant des simulations de dynamique des dislocations sur des configurations appropriées. Pour identifier la valeur des coefficients  $a^{sr}$  de la relation (2)<sub>2</sub>, la méthodologie consiste à mettre en présence deux systèmes de glissement  $s$  et  $r$ . Un cisaillement pur est appliqué graduellement sur le système  $s$  et l'on note la valeur obtenue pour la contrainte d'écoulement. Si l'on répète cela pour deux densités de dislocations sur le système  $r$ , on obtient le coefficient recherché  $a^{sr}$ . Huit simulations sont donc nécessaires pour déterminer les quatre coefficients indépendants de la matrice  $a^{sr}$ . Les résultats de ces simulations donnent des valeurs de  $a^{sr}$  comprises entre 0.14 et 0.27 ce qui signifie que l'on peut approcher la relation (2)<sub>2</sub> au premier ordre par une relation du type  $\tau = \alpha \mu b \sqrt{\rho}$  avec  $\alpha \simeq 0.45$ . Les coefficients intervenant dans la loi d'évolution des densités de dislocations (équation 2)<sub>3</sub> ont également été calculés en utilisant le code de dynamique des dislocations [13]. Pour cela, un système de glissement est forcé à traverser une population de dislocations forêts qui entravent le glissement. A partir de la courbe donnant l'évolution de la densité de dislocations en fonction du glissement accumulé sur le système activé, il est possible d'extraire les paramètres  $y_c$  et  $K$  de l'équation (2)<sub>3</sub>. On obtient  $K = 37$  et  $y_c = b$ .

Bien que très séduisant, cet échange d'informations entre l'échelle des dislocations et celle des milieux continus est néanmoins limité par le temps de calcul prohibitif du code de dislocations. En effet, bien que des astuces pour accélérer les calculs aient été introduites dans le code, il n'est toujours pas possible d'obtenir des déformations de plus de 1% dans des temps de calculs raisonnables.

## V.2 - Théorie continue des dislocations

### V.2.1 - Densité scalaire et tenseur densité de dislocations

On considère un élément de volume monocristallin  $V$  contenant un grand nombre de dislocations. On souhaite suivre l'évolution de cette microstructure au cours de la déformation au travers de grandeurs moyennes. Si  $\xi(\mathbf{x})$  and  $\mathbf{b}(\mathbf{x})$  désignent respectivement les vecteurs ligne et de Burgers au point  $\mathbf{x}$  dans  $V$ , on peut définir une première grandeur

$$\alpha_{ij}(\mathbf{x}) = \langle b_i(\mathbf{x}) \xi_j(\mathbf{x}) \rangle \quad (3)$$

où les crochets désignent une moyenne d'ensemble au point  $\mathbf{x}$  de  $V$ , i.e. une moyenne sur plusieurs réalisations de  $V$ , dans le cadre d'une approche statistique [14]. Ce tenseur densité de dislocations, permet de calculer le défaut de fermeture macroscopique le long d'un circuit  $\Gamma$  délimitant une surface  $S$  contenue dans  $V$  :

$$B_i = \int_S \alpha_{ij} n_j dS = \sum_s \langle b_i^s \int_S \xi_j n_j dS \rangle \quad (4)$$

où  $s$  indique un système de glissement particulier et  $\int_S \xi_j n_j dS$  représente un nombre pondéré de dislocations perçant la surface  $S$ . On peut ensuite définir un tenseur de

corrélation d'ordre 4 :  $\alpha_{ijkl}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle b_i(\mathbf{x})\xi_j(\mathbf{x})b_k(\mathbf{x}')\xi_l(\mathbf{x}') \rangle$  . On calcule l'invariant  $\alpha_{ijij}(\mathbf{x}, \mathbf{x})$  de ce tenseur et sa moyenne sur le volume  $V$  :

$$\frac{1}{V} \int_V \alpha_{ijij}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) dV = \frac{1}{V} b^2 \int_V \chi(\mathbf{x}) dV = b^2 \frac{L}{V} = b^2 \rho \quad (5)$$

où  $\chi(\mathbf{x}) = 0, 1$  est la fonction indicatrice de la présence ou non d'une dislocation au point  $\mathbf{x}$ , et  $L$  est la longueur de ligne des dislocations contenues dans  $V$ . On reconnaît la densité scalaire de dislocations  $\rho$  utilisée en métallurgie physique. On ne mentionne pas plus avant les approches statistiques du comportement collectif des dislocations [10,15,16].

## V.2.2 - Cinématique et statique

Le volume  $V$  précédent représente maintenant un élément de volume infinitésimal  $dV$  d'une structure monocristalline soumise à des sollicitations mécaniques et dont on cherche le champ de déplacement  $u_i$ . Le gradient de la transformation peut être décomposé en chaque point en une contribution élastique et plastique de la manière suivante : une configuration intermédiaire relâchée est définie en découpant l'élément  $dV$  du milieu environnant, le libérant ainsi des contraintes appliquées. Elle n'est toutefois définie qu'à une rotation près et, pour la fixer, on choisit la configuration isocline pour laquelle l'orientation du cristal est la même que l'orientation initiale avant toute déformation [16]. La transformation plastique décrit alors le passage de l'état initial à l'état intermédiaire isocline relâché, et la transformation élastique relie cette dernière à la configuration courante :  $f_{ij} = u_{i,j} = f_{ij}^e + f_{ij}^p$ . Si l'on trace un circuit  $\Gamma$  délimitant une surface  $S$  autour de  $dV$  dans la configuration intermédiaire, le défaut de fermeture résultant permet de relier le tenseur densité de dislocations à la déformation plastique :

$$\mathbf{B} = - \int_{\Gamma} (\mathbf{1} + \mathbf{f}^p)^{-1} \cdot \mathbf{t} d\Gamma = - \int_S (\text{rot } \mathbf{f}^p) \cdot \mathbf{n} dS, \quad \text{i.e. } \underline{\alpha} = -\text{rot } \underline{\mathbf{f}}^p \quad (6)$$

où  $\mathbf{t}$  est le vecteur tangent à la ligne  $\Gamma$ . On peut également relier  $\underline{\alpha}$  à la déformation élastique en utilisant les relations de compatibilité :  $\alpha_{ij} = \epsilon_{jkl} f_{ik,l}^e$ , c'est-à-dire le rotationnel de la transformation élastique. Cette expression implique que  $\text{div } \underline{\alpha} = 0$ , ce qui constitue la version continue de la loi des noeuds pour les dislocations. La théorie continue des dislocations se donne alors pour objectif de calculer les champs de contraintes internes pour une distribution donnée de dislocations  $\underline{\alpha}$ . Les limites de cette approche sont alors claires, aucune loi d'évolution n'est donnée pour  $\underline{\alpha}$  de sorte que cette théorie ne permet pas de prédire le mouvement des dislocations et donc la plasticité induite. Des équations de fermeture ont été proposées pour élargir dans ce sens le domaine d'application de la théorie continue des dislocations [17,18,26].

### V.2.3 - Lien avec la courbure de réseau cristallin

On introduit les vitesses de déformation élastique et plastique ainsi que les vitesses de rotation associées, en prenant les parties symétriques et antisymétriques de  $\dot{\mathbf{f}}^e$  et  $\dot{\mathbf{f}}^p$  respectivement :

$$\dot{f}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij} + \omega_{ij} = \dot{f}_{ij}^e + \dot{f}_{ij}^p = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \omega_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^p + \omega_{ij}^p \quad (7)$$

où  $\omega^p$  représente la vitesse de rotation des directions matérielles par rapport au réseau, et  $\omega^e$  la vitesse de rotation du réseau cristallin par rapport à l'orientation initiale.

Tout tenseur antisymétrique  $\omega$  peut être représenté par un vecteur axial  $\overset{\times}{\omega}$  :

$$\overset{\times}{\omega}_i = -\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\omega_{jk}, \quad \omega_{ij} = -\epsilon_{ijk}\overset{\times}{\omega}_k, \quad \text{tel que } \omega \cdot \mathbf{x} = \overset{\times}{\omega} \times \mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{x} \quad (8)$$

Remarque que si  $\omega_{ij} = (\dot{u}_{i,j} - \dot{u}_{j,i})/2$ , alors  $\overset{\times}{\omega}_i = -\frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\dot{u}_{j,k}$ ,  $\overset{\times}{\omega} = -\frac{1}{2}\text{rot } \dot{\mathbf{u}}$ . On

définit ensuite le vecteur rotation de réseau tel que  $\overset{\times}{\Phi} = \overset{\times}{\omega}^e$  et le tenseur de courbure-torsion du réseau  $\kappa_{ij} = \Phi_{i,j}$ . En négligeant les contributions dues à la déformation élastique, on obtient la relation de Nye [19] liant courbure de réseau et tenseur densité de dislocations :  $\alpha_{ij} = \kappa_{ji} - \kappa_{mm}\delta_{ij}$ .

## V.3 - Elastoviscoplasticité du monocristal

### V.3.1 - Lois de comportement à variables internes

Le cadre mécanique de la modélisation macroscopique du comportement du monocristal a été établi dans [16,20]. Il s'appuie sur la prise en compte des glissements  $\gamma^s$  sur les systèmes de glissement cristallographique  $s$  et sur la loi de Schmid impliquant la contrainte résolue  $\tau^s = m_i^s \sigma_{ij} n_j^s$  :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s (m_i n_j + m_j n_i)/2, \quad \dot{\gamma}^s = \text{Max} \left( 0, \left( \frac{|\tau^s - x^s| - \tau_c^s}{k} \right)^n \right) \text{signe}(\tau^s - x^s) \quad (9)$$

où  $\mathbf{m}^s$  et  $\mathbf{n}^s$  désignent respectivement la direction de glissement et la normale au plan de glissement pour le système  $s$ . Une formulation viscoplastique est retenue, de type Norton à seuil, de façon à éviter les problèmes d'indétermination du nombre de systèmes actifs dans le cas strictement indépendant du temps. Les grandeurs  $\tau_c^s$  et  $x^s$  sont les variables d'écroutissage isotrope et cinématique au niveau du système de glissement [21]. Leur lois d'évolution sont non linéaires et, dans le cas le plus simple, prennent la forme :

$$\tau_c^s = \tau_{c0} + Q \sum_r H^{sr} (1 - e^{-Bv^r}), \quad v^s = |\dot{\gamma}^s|, \quad x^s = C\alpha^s, \quad \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - Dv^s \alpha^s \quad (10)$$

Ces lois impliquent une saturation des écrouissages isotrope et cinématique vers  $\tau_{c0} + Q$  et  $C/D$  respectivement (sous chargement monotone et en glissement simple). La prise en compte de l'écrouissage latent se fait par l'intermédiaire de la matrice d'interaction  $H^{rs}$  [22]. Les paramètres de ces lois ont été identifiés pour des chargements monotones et cycliques pour le cuivre, des superalliages base nickel monocristallins, etc. [21]. D'autres lois phénoménologiques d'évolution de l'écrouissage isotrope ont été proposées en termes de densités scalaires de dislocations [23]. L'une des plus couramment utilisées a déjà été mentionnée, équation (2)<sub>3</sub>. On reconnaît dans le terme  $\sqrt{\sum_r d^{sr} \rho^r / K}$  l'inverse d'un libre parcours moyen  $1/L$ . On remarquera alors, dans le cas simplifié où  $L$  est prise constante, qu'un changement de variables dans les équations (10) et une expression de la loi d'écrouissage sous forme d'équation différentielle, conduisent à :

$$\varrho^s = 1 - e^{-bv^s}, \quad \dot{\varrho}^s = B(1 - \varrho^s)|\dot{\gamma}^s| \quad (11)$$

ce qui équivalent à (2)<sub>3</sub>. Cette remarque réconcilie les approches purement mécaniciennes et plus métallurgiques.

### V.3.2 - Lois non locales et effets d'échelle

On remarque que si l'on exprime l'équation (2)<sub>3</sub> avec la variable  $\rho b^2$ , les coefficients n'ont plus la dimension d'une longueur, de sorte que cette loi n'introduit pas de longueur caractéristique réelle dans la modélisation et est donc incapable de rendre compte d'effets d'échelles observés expérimentalement (effet de taille de grain ou de cellules de dislocations). Le recours à des modèles à variables non locales permet d'y remédier. Le tenseur de courbure  $\kappa_{ij}$  ou de manière équivalente le tenseur densité de dislocations introduits précédemment sont des variables de type non local puisque de dimension  $m^{-1}$ . Dans des cas simples uniaxiaux, Ashby [24] relie la courbure à une « densité de dislocations d'accommodation géométrique »  $\rho^G = b\kappa$ , par opposition à la densité dite de « dislocations statistiquement distribuées »  $\rho^S$ , ne donnant lieu à aucun vecteur de Burgers résultant. Noter que cette dénomination reste ambiguë et on préférera travailler avec  $\alpha$ ,  $\kappa$  et  $\rho$  directement. On propose alors de distinguer la contribution de ces densités à l'écrouissage et voici deux formes possibles de lois d'écrouissage étendues :

$$\tau_c = \mu b \sqrt{\rho^S + a\rho^G}, \quad \tau_c^s = \tau_{c0} + Q \sum_r H^{sr} (1 - e^{-Bv^s}) + H' l_c \kappa^s \quad (12)$$

la première en termes de  $\rho^G$ ,  $\rho^S$ , la seconde reprenant (10) et ajoutant un terme proportionnel à l'angle de courbure du réseau cristallin sur une longueur caractéristique donnée  $l_c$ . Des paramètres matériaux nouveaux  $a$  ou  $H'$  doivent être identifiés à partir d'essais mécaniques mettant en évidence les effets d'échelles étudiés (effet de taille de grain ou de précipités sur le comportement élastoplastique des matériaux [24, 25, 26, 27]).

## V.4 - Passage au polycristal

Les lois de comportement précédemment établies peuvent être utilisées pour prévoir le comportement mécanique du polycristal. De nombreuses applications ont montré la pertinence de ces modèles dans le cas de multicristaux, i.e. d'éprouvettes constituées d'un nombre limité de gros grains [12,28,29]. On présente ici l'étude du volume élémentaire représentatif de polycristal (VER), contenant donc un grand nombre de grains. On évoque successivement les modélisations décrivant explicitement le comportement hétérogène intragranulaire, puis les modèles simplifiés ne s'intéressant qu'à des grandeurs moyennes.

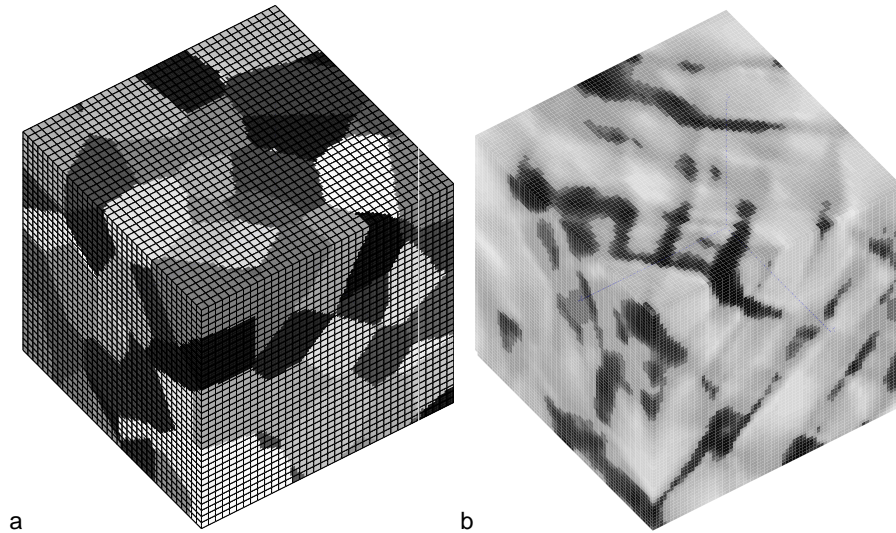


Figure 2 - Calculs d'agrégats polycristallins  
 a - Distribution des grains dans le VER.  
 b - Champ de déformation plastique équivalente en traction.

### V.4.1 - Calculs d'agrégats polycristallins

Le calcul d'un VER par éléments finis se heurte à trois difficultés principales. Il faut d'abord choisir un modèle géométrique de répartition des grains dans l'espace. L'hypothèse d'un agrégat polycristallin comme mosaïque de Voronoi semble suffisamment réaliste [30] (figure 2a). Il faut ensuite savoir appliquer des conditions aux limites pour solliciter cet élément de volume. Pour cela les méthodes d'homogénéisation nous enseignent la manière d'imposer une déformation ou une contrainte moyenne à un volume [31] avec des conditions dites homogènes au contour ou périodiques. Enfin, pour être représentatif, le volume doit contenir un grand nombre de grains (1000 environ pour des c.f.c. sans texture marquée), ce qui conduit, dans le cas réaliste tridimensionnel, à des tailles de calcul considérables. Le calcul parallèle est la réponse actuelle à



cette difficulté [28,30]. De tels calculs ont révélé la formidable hétérogénéité aussi bien en contrainte qu'en déformation, qui se développe au sein des grains du polycristal. En particulier la déformation plastique peut se développer sous forme de bandes de déformation intense (figure 2b). Ces modèles donnent accès à d'autres informations telles que l'influence des joints de grain sur les hétérogénéités locales. C'est l'outil idéal pour aborder les problèmes d'endommagement inter ou transgranulaire.

### V.4.2 - Méthodes d'homogénéisation

Pour de nombreuses applications, comme la prédiction d'évolution de texture ou le calcul de chargements mécaniques multiaxiaux complexes macroscopiques, il peut être suffisant de considérer les contraintes et déformations moyennes sur tous les grains ayant une orientation cristallographique donnée à un angle solide près au sein du VER. Il s'agit alors de pouvoir estimer ces grandeurs sans passer par les calculs coûteux de la section précédente. L'hypothèse la plus simple consiste à négliger les hétérogénéités de déformation au sein des grains, voire de grain à grain : c'est le modèle de Taylor qui consiste à appliquer la déformation macroscopique pour chaque orientation et à calculer la réponse en contrainte grâce aux lois de comportement de la section 3.1. L'approche duale, dite modèle statique, considère des contraintes homogènes et évalue les déformations qui en résultent. Les déformations et contraintes macroscopiques sont, dans ces modèles d'homogénéisation, les moyennes des valeurs pour chaque orientation pondérée par les fractions volumiques correspondantes, ce qui nécessite la connaissance de la fonction de distribution des orientations cristallines. Le modèle dit autocohérent accepte, quant à lui, une hétérogénéité à la fois en déformation et en contrainte d'orientation à orientation [34]. Cette dernière approche est en général plus fidèle au comportement du polycristal et est en accord avec les résultats des calculs d'agrégats, au moins dans le cas élastoplastique isotrope pour les c.f.c. [30]. En particulier, le modèle de Berveiller-Zaoui [32] fournit une estimation explicite des contraintes moyennes des grains ayant une orientation donnée  $g$ , dans le cas d'un polycristal isotrope :

$$\sigma_{ij}^g = \Sigma_{ij} + \mu\beta(E_{ij}^p - \varepsilon_{ij}^{pg}) \quad (13)$$

où  $\sigma^g$ ,  $\Sigma$ ,  $E^p$  et  $\varepsilon^{pg}$  sont respectivement la contrainte moyenne pour la phase  $g$ , la contrainte macroscopique, la déformation plastique macroscopique et la déformation plastique moyenne pour la phase  $g$ . La fonction  $\beta$  évolue avec la déformation plastique totale et varie de 1 en début de plastification jusqu'à environ 0.01 en plasticité étendue. Ces modèles sont très efficaces et déjà utilisés dans le domaine industriel. Ils ont toutefois une tendance à sous-estimer les hétérogénéités de déformation et restent difficilement applicables au cas général du comportement élastoviscoplastique sous chargement complexe, notamment cyclique.

#### Références

- [1] J.P. Hirth et J. Lothe, *Theory of Dislocations 2nd edition*, Wiley Interscience, New York, (1982).
- [2] J. Lépinoux et L.P. Kubin, *Scripta Metall* 21(6) (1987) 833-838.

MODELES DISCRETS ET CONTINUS DE LA DEFORMATION PLASTIQUE

- [3] N.M. Ghoniem et R. Amodeo, *Solid State Phenom.* 3&4 (1988) 377-388.
- [4] E. van der Giessen et A. Needleman, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 3 (1995) 689-735.
- [5] L.P. Kubin, G.R. Canova, M. Condat, B. Devincere, V. Pontikis et Y. Bréchet, *Solid State Phenom.* 23&24 (1992) 455.
- [6] J.P. Hirth, M. Rhee and H.M Zbib, *J. Comp. Mater. Design* 3 (1996) 164.
- [7] K.W. Schwarz, *Phys. Rev. Lett.* 38 (1997) 4785.
- [8] R. Kukta, Ph D. thesis, Brown University, 1998.
- [9] N.M. Ghoniem, S.H. Tong et L.Z. Sun, *Phys. Rev. B* 61(1) (2000) 61.
- [10] M. Verdier, M.C. Fivel et I. Groma, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 6 (1998) 755-770.
- [11] M.C. Fivel, C.F. Robertson, G.R. Canova et L. Boulanger, *Acta Mater.* 46 (1998) 6183.
- [12] C. Teodosiu, J.L. Raphanel et L. Tabourot, In *Large Plastic Deformations*, Mécatmat 91, Balkema, Rotterdam (1993) 153.
- [13] M. Fivel, L. Tabourot, E. Rauch et G. Canova, *J. Phys. IV Pr8* (1998) 151.
- [14] E. Kröner, In *Inelastic Behaviour of Solids*, ed. Kanninen M.F., Adler W.F., Rosenfield A.R., Jaffee R.I., McGraw-Hill, New York, (1969) 137.
- [15] H. Zorski, *Int. J. Solids Structures* 4 (1968) 959.
- [16] J. Mandel, *Int. J. Solids Structures* 9 (1973) 725.
- [17] K.C. Le et H. Stumpf, *Int. J. Plasticity* 12 (1996) 611.
- [18] A. El-Azab, *Physical Review B* 61 (2000) 956.
- [19] J.F. Nye, *Acta Metall.* 1 (1953) 153.
- [20] R.J. Asaro, *J. of Appl. Mechanics* 50 (1983) 921.
- [21] L. Méric, G. Cailletaud et M. Gaspérini, *Acta Metall. Mater.* 42 (1994) 921.
- [22] P. Franciosi, *Acta Metall.* 33 (1985) 1601.
- [23] Y. Estrin, *Unified Constitutive Laws of Plastic Deformation*, Academic Press (1996) 69.
- [24] M.F. Ashby, In *Strengthening Methods in Crystals*, ed. by A. Kelly et R.B. Nicholson, Applied Science Publishers, London (1971) 137.
- [25] N.A. Fleck et J.W. Hutchinson, *J.W.*, *Advances in Applied Mechanics* 33 (1997) 295.
- [26] S. Forest, F. Barbe et G. Cailletaud, *Int. J. Solids Structures* 37 (2000) 7105.
- [27] R. Sedlacek et S. Forest, *physica status solidi (b)* 221 (2000) 583.
- [28] F. Eberl, F. Feyel, S. Quilici et G. Cailletaud, *J. Physique IV France* 8 (1998) 15.
- [29] F. Delaire, J.L. Raphanel et C. Rey, *Acta Mater.* 48 (2000) 1075.
- [30] F. Barbe, G. Cailletaud, S. Forest, D. Jeulin, *Int. J. Plasticity* 17 (2001) 513.
- [31] A. Zaoui, In *Homogenization techniques for composite media*, ed. by E. Sanchez-Palencia et A. Zaoui, *Lecture notes in physics* 272, Springer-Verlag (1985).
- [32] M. Berveiller et A. Zaoui, *J. Mech. Phys. Solids* 26 (1979) 325.