
Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis

Georges Cailletaud* — Philippe Pilvin**

* Centre des Matériaux de l'École des Mines de Paris,
URA CNRS 866, B.P. 87, 91003 Évry cedex

** Centre des Matériaux de l'École des Mines de Paris
et Université Pierre et Marie Curie, Paris

RÉSUMÉ. Les relations de comportement basées sur l'approche polycristalline qui intègrent des informations microstructurales offrent des capacités de modélisation étendues par rapport aux approches macroscopiques. Le but de cet article est de montrer que ces relations sont maintenant utilisables en calcul de structure. Le matériau est représenté en chaque point de Gauss par quelques dizaines ou quelques centaines de grains, soit un nombre de variables internes compris entre 1000 et 10000. Les applications qui sont montrées comportent d'une part des calculs de structure classiques, qui permettent en particulier une bonne prise en compte des textures cristallographiques, mais également des calculs orientés vers la mécanique des matériaux, qui donnent l'occasion de vérifier la cohérence des modèles préconisés.

ABSTRACT. The constitutive equations based on polycrystalline models include information on the microstructure of the metallic materials and offer extended modelling capabilities with respect to macroscopic approaches. The purpose of this paper is to show that they can now be used in finite element calculations. The material is then modelled in each Gauss point by a set of about 1000 to 10000 internal variables, corresponding to tens or hundreds grains. The examples shown consist first in ordinary structural calculations, allowing a good representation of texture effect, but also computations for mechanics of materials, giving the opportunity to check the consistency of the proposed models.

MOTS-CLÉS : comportement inélastique, calculs par éléments finis, viscoplasticité cristalline, chargements cycliques.

KEY WORDS : inelastic behaviour, finite element calculations, polycrystalline viscoplasticity, cyclic loading.

1. Introduction

L'idée de base des modélisations cristallographiques de la plasticité est que le fait d'introduire des variables attachées aux mécanismes physiques est bénéfique pour les capacités de modélisation des relations de comportement correspondantes. De fait, si l'aspect physique des mécanismes de déformation est bien représenté par les équations, le caractère prédictif des équations est amélioré, y compris pour des chargements complexes situés hors du domaine d'identification initial du modèle étudié. Le but poursuivi en explorant ces familles de modèles est de tendre vers une approche *déductive* qui permette d'établir le comportement d'un matériau à partir de la caractérisation de sa microstructure. Après les travaux de Sachs [SAC 28], Taylor [TAY 38], Lin [LIN 57], les modèles polycristallins ont fait des progrès notables avec Hill [HIL 65], Hutchinson [HUT 70], ou encore Berveiller et Zaoui [BER 79]. Cependant, durant de longues années, les applications sont restées confinées à des éléments de volume, en raison des difficultés de mise en œuvre liées au grand nombre de variables et au caractère implicite des relations de comportement.

A l'opposé, les approches *inductives*, dans laquelle la forme des modèles est déduite d'une étude phénoménologique de la déformation macroscopique ont connu un grand développement au cours des vingt dernières années. Dans ce cas, les variables sont moyennées sur l'élément de volume de la mécanique des structures. Plusieurs dizaines de modèles ont vu le jour (voir par exemple [HAR 76], [VAL 80], [LEM 85], [YAO 85], [MIL 87], [MRO 87], ..), dont le principe est d'ajouter une ou plusieurs variables spécifiques pour représenter un phénomène donné (voir par exemple [CAI 79], [CHA 79], [OHN 82], [DEL 86], [BEN 87],...). Des premiers bilans peuvent être maintenant tirés [CHA 89], et les recherches en sont au point où les modèles peuvent être couramment utilisés en calcul de structures pour des applications de type industriel [AAZ 92], [KRU 92], même s'il subsiste encore des investigations à faire, ainsi dans le domaine de la prise en compte des températures variables [FRE 93], des interactions plasticité-viscoplasticité ([CON 89]), ou de la représentation du rochet [CHA 91], [OHN 93]. Il reste que ce type d'approche n'est pas très approprié dès lors qu'il s'agit de prendre en compte des phénomènes qui mettent en jeu de façon directe la microstructure, comme le comportement des monocristaux, les effets d'anisotropie liés à la texture cristallographique ou bien encore les couplages thermomécaniques.

Le développement des moyens de calcul informatiques a donné un élan considérable à la simulation numérique. Il fournit maintenant les moyens d'évaluer de mieux en mieux les différentes approches cristallines proposées et, en même temps, il est réaliste d'envisager l'utilisation de modèles de ce type en éléments finis. Ceci explique qu'après les calculs portant sur des structures ou des éprouvettes monocristallines, réalisés au cours des années 80, par exemple [ASA 83], on trouve maintenant dans la littérature des résultats de simulations utilisant le modèle de Taylor [MAT 90], [KAL 92], ou même des modèles plus évolués.

Ce travail se situe à la suite d'études qui ont permis la définition [CAI 88], [CAI 92] et le développement [PIL 94a] d'un modèle polycristallin et, en parallèle, son implémentation dans un code de calcul par éléments finis, dans sa version monocristalline [MÉR 91], puis dans sa version polycristalline [PIL 93]. Il s'agit d'un modèle spécialement adapté pour les chargements cycliques, écrit dans le cadre de la viscoplasticité, et dont la formulation permet une mise en œuvre simple dans un code de calcul. Après avoir replacé le modèle parmi les formulations polycristallines plus classiques, on en détaillera les équations (partie 2), puis on montrera son implémentation numérique (partie 3). Deux types d'applications seront ensuite traités :

- des calculs de type "mécanique des matériaux" (partie 4), portant sur des éléments de volume macroscopiques; dans la mesure où la difficulté essentielle des approches micromécaniques réside dans les relations de changement d'échelles, il est important de pouvoir vérifier par le calcul que les relations qui ont été utilisées sont cohérentes, c'est-à-dire que la relation de comportement obtenue au niveau global pour l'agrégat est en bon accord avec le résultat du calcul de l'assemblage qui le constitue ;

- des calculs de structure (partie 5), qui permettent d'utiliser directement le modèle obtenu pour évaluer les champs de contrainte et de déformation globaux (à l'échelle de l'élément de volume mécanique) et locaux (à l'échelle de la microstructure) dans une éprouvette de laboratoire ou une pièce industrielle.

2. Les approches micromécaniques

On rappelle, dans un premier temps, la démarche générale suivie, pour les polycristaux métalliques, pour construire une relation de comportement macroscopique à partir d'une description simplifiée de la microstructure. On présente ensuite, de façon plus détaillée, le modèle micromécanique qui est développé actuellement au Centre des Matériaux pour le comportement sous sollicitations cycliques.

2.1. Les modèles polycristallins classiques

Une des difficultés principales des approches micromécaniques, prenant en compte le caractère micro-hétérogène de l'élément de volume représentatif du mécanicien des structures, réside dans le choix des échelles et des mécanismes élémentaires à introduire. Pour les matériaux métalliques, malgré les progrès de la physique des solides au niveau des mécanismes opérant à l'échelle atomique (dislocations), il est actuellement nécessaire d'adopter une description simplifiée de la microstructure et la qualité des modèles sera conditionnée par cette schématisation. L'objectif final étant de construire la relation de comportement mécanique au niveau de l'élément de volume, une schématisation simplifiée doit prendre en compte au

minimum les niveaux d'hétérogénéité immédiatement inférieurs. La majorité des modèles se limitent actuellement à l'introduction d'un seul niveau d'hétérogénéité, qui est le grain.

2.1.1. *Écrouissage intragranulaire*

Après des travaux sur les monocristaux [KOI 60], [MAN 65], ces modèles se sont essentiellement développés en France sous l'impulsion de Mandel [ZAR 68], [BUI 69], [ZAO 70]. Les principales applications ont été ensuite réalisées en grandes transformations sous sollicitations généralement monotones, avec pour objectif la détermination des limites d'écoulement et la prévision de l'évolution des textures cristallographiques [BER 78], [ARM 87], [MOL 87], [HAR 91]. Il y a eu également quelques tentatives dans le domaine des sollicitations cycliques [COM 74], [ENG 78]. Il faut noter que la majorité de ces approches classiques utilisent l'hypothèse simplificatrice d'uniformité des champs mécaniques dans chaque phase, la définition des "phases" granulaires ne prenant en compte comme paramètre caractéristique d'un point de vue géométrique que l'orientation cristalline. En particulier, la notion de taille de grains n'intervient pas et par ailleurs, sauf pour quelques modèles, un "grain" n'a pas de position géométrique précise par rapport aux autres "grains" de l'élément de volume représentatif. En fait, cette notion de phase doit être considérée comme un concept mécanique qui sera utile pour bien poser le problème du changement d'échelles.

Pour un "grain", la schématisation du comportement mécanique se limite en général à reconnaître comme mécanisme de déformation principal le glissement cristallographique. Le comportement est défini à l'aide de la loi de Schmid généralisée qui suppose qu'un système de glissement est actif lorsque sa cission résolue atteint une valeur critique. Une possibilité d'écrouissage est introduite au niveau des mécanismes en supposant que la valeur de la cission critique sur chaque système de glissement peut dépendre des variables d'écrouissage des autres systèmes de glissement du grain (écrouissage latent [MAN 65], [KOC 66], [FRA 85]). La connaissance pour un grain de toutes les vitesses de glissement $\dot{\gamma}_s$ sur ses systèmes permet de reconstruire classiquement sa vitesse de déformation plastique $\underline{\dot{\epsilon}}^p$ par l'expression :

$$\underline{\dot{\epsilon}}^p = \text{Som}_{s \in S} (\underline{m}_s, \dot{\gamma}_s) \quad \text{avec} \quad \underline{m}_s = (1/2) [\underline{n}_s \otimes \underline{l}_s + \underline{l}_s \otimes \underline{n}_s] \quad [1]$$

où \underline{m}_s caractérise l'orientation du système de glissement, définie par la normale unitaire \underline{n}_s de son plan et sa direction de glissement \underline{l}_s . Le calcul de la cission résolue sur le système de glissement s'exprime par l'intermédiaire du tenseur d'orientation en fonction de la contrainte locale dans le grain $\underline{\sigma}$ et vaut $\tau_s = \underline{\sigma} : \underline{m}_s$. Pour définir complètement le comportement mécanique au niveau le plus élémentaire, il reste à préciser les règles d'évolution des variables intragranulaires et plus particulièrement celle de γ_s . Il existe, à ce niveau, de nombreuses possibilités. Les plus simples

utilisent uniquement comme variables d'érouissage les glissements sur les systèmes [TAY 38], les plus complexes introduisent directement des variables associées aux densités de dislocations [ZAR 73], [HES 93], [TRA 93]. Dans tous les cas, cela conduit à représenter un érouissage de type isotrope sur chaque système de glissement, cet érouissage étant de type additif (éq. [2a]) en plasticité indépendante du temps, et de type multiplicatif, sans seuil (éq. [2b]) pour le cas de la viscoplasticité.

$$\text{- cas plastique, seuil sur le système } s : f_s = \tau_s - \tau_0 \quad [2a]$$

$$\text{- cas viscoplastique : } \dot{\gamma}_s = (\tau_s / \tau_0)^n \quad [2b]$$

Ce type de modélisation de l'érouissage intragranulaire suppose en fait qu'il n'y a pas d'hétérogénéité à l'intérieur du grain, puisque γ_s représente la valeur moyenne du glissement dans la phase. Or la littérature rappelle qu'à chaque fois que le matériau est hétérogène (précipités [BRO 78], cellules [MUG 87]), il faut utiliser comme variable critique des mécanismes de déformation une contrainte effective, différence entre la contrainte appliquée et une *contrainte interne*. Cette dernière définit un nouvel état neutre du matériau, et permet de représenter correctement l'effet Bauschinger.

Sous chargement cyclique, il faut impérativement disposer d'un tel modèle. Il est possible de faire explicitement figurer l'aspect hétérogène observé à l'intérieur d'un grain, comme par exemple [BER 93]. Mais l'efficacité numérique commande plutôt de suivre une approche plus phénoménologique. C'est ce qui a déjà été proposé par Weng [WEN 80] ou par Kratochvil et Tokuda [KRA 84], dans des formulations qui reconnaissent indirectement la nécessité d'introduire deux contributions à l'érouissage local, isotrope et cinématique. C'est cette dernière voie qui a déjà été utilisée [CAI 87] pour introduire, au niveau local, une variable d'érouissage cinématique dont la loi d'évolution est analogue à la règle d'Armstrong-Frederick [ARM 66]. Ce choix constitue une solution pragmatique pour décrire avec peu de variables l'hétérogénéité intragranulaire, il sera détaillé dans le paragraphe 2.2.

2.1.2. Relations de changement d'échelle

Pour définir complètement le modèle polycristallin, il convient maintenant de définir les équations permettant de relier les variables de chaque grain de l'agrégat polycristallin ($\underline{\sigma}$, $\underline{\varepsilon}$, $\underline{\varepsilon}^p$) aux variables globales ($\underline{\Sigma}$, \underline{E} , \underline{E}^p). On dispose aujourd'hui, avec les approches auto-cohérentes, de bonnes descriptions pour schématiser les interactions entre les grains [ZAO 91]. Les approches à un site consistent à évaluer l'état de contrainte dans une phase, dont le comportement mécanique est connu, en la considérant comme une inclusion de forme ellipsoïdale dans un matériau homogène équivalent. Elles permettent également de préciser les hypothèses, parfois implicites, qui existent dans d'autres règles de changement d'échelles. En se limitant au cas d'un comportement globalement isotrope, qui permet de considérer la déformation

inélastique globale comme la moyenne des déformations inélastiques locales, il est possible d'exprimer *a priori* ce type de relations à l'aide de l'expression suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} + a \mu (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\epsilon}}^p) \quad [3]$$

On retrouve suivant la valeur de a , le modèle à contrainte uniforme ($a=0$) [BAT 49], le modèle de Lin-Taylor ($a=2$) [LIN 57], ou bien l'approche auto-cohérente à accommodation élastique ($a=1$) [KRÖ 61]. D'un point de vue pratique, cette expression est souvent utilisée avec une valeur de a constante de l'ordre de 0.01 à 0.2 [BER 87], [CAI 88], car une accommodation purement élastique conduit à surestimer les contraintes intergranulaires [ZAO 72]. Dans le cas de la plasticité indépendante du temps, l'introduction d'une possibilité d'accommodation élastoplastique de la matrice a été proposé par [HIL 65], mais elle conduit à une relation intégrale implicite dont l'emploi est délicat. Il est cependant possible de simplifier cette relation [BER 79], en substituant dans l'équation [3] le module élastique par le module élastoplastique sécant (avec $a=1$). Cette modification est importante surtout si le domaine d'application visé est celui des petites déformations, ce qui est le cas pour les sollicitations cycliques. Par contre, l'utilisation d'un module élastoplastique sécant se limite aux sollicitations monotones et radiales. Pour le cas où le modèle intragranulaire est de type viscoplastique, seul le cas de la viscoplasticité sans élasticité a été traité de façon à la fois rigoureuse et "opérationnelle" pour qu'il soit possible d'envisager une utilisation intensive [MOL 87]. Les méthodes de passage micro-macro dans le cas d'un matériau élasto-viscoplastique sont encore en plein développement [KOU 91], [ROU 94].

2.2. Le modèle polycristallin retenu

La modélisation micromécanique retenue pour cette étude est une évolution de l'approche développée initialement [CAI 87], [PIL 90a], [CAI 92]. Il n'y a pas de changement sur le cadre de la formulation au niveau local, qui est de type viscoplastique, afin de rendre plus efficace le traitement numérique des équations du modèle. Ce choix classique permet d'évaluer la vitesse de glissement instantanée sur un système de glissement en fonction uniquement de la valeur actuelle de la cisssion résolue et des variables d'écrouissage. Il permet cependant, par un choix approprié des coefficients k et n caractérisant la viscosité (éq. [4e]) de rendre le comportement global quasi-indépendant du temps. Sa principale originalité est l'utilisation au niveau local de variables d'écrouissage bien adaptées pour la description du comportement cyclique. L'ensemble des équations du modèle est décrit dans le tableau 1. La relation de localisation (éq. [4a]) est posée *a priori* sous une forme explicite en introduisant une variable supplémentaire $\underline{\underline{\beta}}^s$ par phase pour permettre une accommodation inélastique des contraintes internes [PIL 90b]. La forme de la loi d'évolution de cette variable (éq. [4h]) permet de retrouver, au début de l'écoulement plastique, le modèle de Kröner et le terme de rappel de cette équation permet d'accommoder les incompatibilités intergranulaires de façon non-linéaire. Elle

conduit, pour les sollicitations monotones, à une règle de localisation analogue à l'expression simplifiée proposée par [BER 79].

Pour décrire le comportement local de chaque grain, on utilise une approche de nature plus inductive afin de ne pas décrire de façon complète les hétérogénéités intragranulaires. Pour chaque mécanisme de glissement, deux variables d'écroutissage sont introduites. Le phénomène d'écroutissage latent, essentiel pour décrire le sur-écroutissage induit par les sollicitations non proportionnelles, est schématisé par l'intermédiaire de la variable isotrope r_s en introduisant, pour une de ces composantes, une matrice d'interaction h_{rs} entre les systèmes (éq. [4c]). La variable d'écroutissage cinématique x_s permet de tenir compte des hétérogénéités locales présentes dans chaque grain et, pour cette variable, une possibilité de restauration par le temps peut être également introduite (éq. [4f]).

Relation de localisation :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} + \mu [\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}^g] \quad ; \quad \underline{\underline{B}} = \text{Som}_{g \in G} (f_g \underline{\underline{\beta}}^g) \quad [4a]$$

Relation de comportement pour chaque phase :

$$\tau_s = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m}}_s \quad [4b]$$

$$x_s = c \alpha_s \quad ; \quad r_s = Q_1 \text{Som}_{r \in S} \{h_{rs} q_r\} + Q_2 \rho_s \quad [4c]$$

$$F_s = |\tau_s - x_s| - r_0 - r_s \quad [4d]$$

$$\dot{\gamma}_s = [\text{Max}\{0; (F_s/k)\}]^n \quad ; \quad \dot{\gamma}_s = \dot{\gamma}_s \text{Signe}(\tau_s - x_s) \quad [4e]$$

$$\dot{\alpha}_s = \dot{\gamma}_s - (d/c) x_s \dot{\gamma}_s - \{ |x_s|/M \}^m \text{Signe}(x_s) \quad ;$$

$$\dot{q}_s = \dot{\gamma}_s [1 - b_1 q_s] \quad ; \quad \dot{\rho}_s = \dot{\gamma}_s [1 - b_2 \rho_s] \quad [4f]$$

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^P = \text{Som}_{s \in S} (\underline{\underline{m}}_s \dot{\gamma}_s) \quad [4g]$$

$$\underline{\underline{\dot{\beta}}}^g = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^P - D \{ \underline{\underline{\beta}}^g - \delta \underline{\underline{\epsilon}}^P \} \|\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^P\| \quad \text{avec} \quad \|\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^P\| = \sqrt{(2/3) \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^P : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^P} \quad [4h]$$

Homogénéisation :

$$\underline{\underline{E}}^P = \text{Som}_{g \in G} (f_g \underline{\underline{\epsilon}}^P) \quad ; \quad \underline{\underline{E}}^e = (1/2\mu) \{ \mathbf{I} - \{ \nu/(1+\nu) \} \underline{\underline{1}} \otimes \underline{\underline{1}} \} \underline{\underline{\Sigma}} \quad [4i]$$

Tableau 1. *Équations du modèle polycristallin*

D'un point de vue pratique, l'augmentation significative de la puissance des moyens de calcul permet de rendre utilisable ce type de modèle pour simuler des expériences où les champs mécaniques sont homogènes (essais de traction-compression, essais de traction-torsion-pression interne sur tube mince), ce qui permet l'identification des coefficients du modèle. Une des difficultés principales de l'identification est liée au couplage important qui existe entre les contraintes internes de nature intergranulaire et la variable d'écroutissage x_s introduite dans la loi d'évolution du glissement intragranulaire. En effet, ces deux variables conduisent à un écroutissage de nature cinématique à l'échelle globale et il est très difficile, à partir d'informations purement macroscopiques, de découpler ces deux sources. En fait, cette difficulté est directement liée à l'identification des coefficients D et δ de l'équation [4h]; ces paramètres ne devraient pas, en toute rigueur, être recalés puisqu'ils sont directement dépendants du comportement local retenu pour chaque grain. Ce point sera examiné en partie 4.

3. Utilisation du modèle polycristallin

3.1. Identification

La première étape de l'identification d'un modèle polycristallin consiste à définir en termes d'orientations cristallographiques la microstructure sur laquelle s'effectuera la simulation numérique. C'est bien entendu à ce niveau que se différencient des matériaux de structure CFC ou HC, par exemple. Le cas de ces derniers est en cours d'étude ([PIL 91] sur le zirconium et [FEA 94] sur un alliage de titane). Les cas étudiés ici concernent tous des matériaux CFC. Pour des raisons de place, les distributions d'orientations ne seront pas reportées. Il suffit d'un faible nombre de grains pour décrire le comportement d'un matériau initialement isotrope. Ainsi, [PIL 90b] utilise 40 orientations couvrant l'ensemble du triangle standard, [LEG 94] travaille avec 100 orientations tirées au hasard. D'autres calculs ont été effectués avec 1000 et 2000 orientations [CAI 87]. Dans le cas d'une microstructure anisotrope, il faut introduire directement dans le calcul les résultats des mesures de texture, en conservant, le cas échéant un nombre réduit d'orientations par rapport au nombre de "cases" analysées par la méthode vectorielle [VAD 81].

Il est bien sûr possible d'effectuer des comparaisons entre le modèle et des observations microstructurales, en comptant par exemple les traces de plans de glissement [PIL 90b]. Néanmoins l'identification du modèle s'effectue essentiellement sur la réponse mécanique contrainte-déformation. Il est bien entendu préférable de disposer de la base expérimentale la plus large possible. Les spécificités du modèle sont telles qu'il est souhaitable d'avoir des informations (i) sur la viscosité, si elle est présente, au travers d'essais à différentes vitesses (dans le cas contraire, il est possible d'annuler l'effet de vitesse comme indiqué au paragraphe 2.2), (ii) sur le comportement cyclique, au travers d'essais d'écroutissage cyclique, (iii) si possible sur le comportement multiaxial, afin de caractériser la matrice d'interaction.

Le modèle est implanté dans le programme d'identification SiDoLo [PIL 88]. L'intégration est effectuée avec une méthode de Runge-Kutta munie d'un pas automatique, qui est exposée dans le paragraphe suivant. Le code effectue l'intégration pour un élément de volume mécanique, soumis à un chargement 3D quelconque, en contrainte ou déformation imposées sur chaque composante. L'identification des coefficients du matériau est le résultat d'un processus d'optimisation portant sur une fonctionnelle définie par la somme du carré des écarts entre l'expérience et la simulation portant sur la variable non commandée. Il est maintenant classique avec cette procédure de travailler sur une vingtaine d'essais simultanément, afin d'identifier la dizaine de coefficients que peut compter le modèle.

3.2. Utilisation dans un code de calcul par éléments finis

Le modèle a été implanté dans le code de calcul ZéBuLoN développé au Centre des Matériaux [BUR 91]. Ce travail est grandement facilité par le fait que le code de calcul par éléments finis a été spécialement adapté pour recevoir directement les sous-programmes développés dans le cadre de SiDoLo. Ainsi est-il possible de travailler avec exactement la même intégration, et les mêmes variables d'état. En éléments finis, les inconnues du problème sont les déplacements nodaux, dans le cas du modèle polycristallin comme pour un modèle plastique ou viscoplastique classique, si bien que la résolution globale est inchangée. L'expression de la relation de comportement n'est donc sensible qu'à l'intérieur de chaque élément. A ce niveau, il faut, à partir de l'incrément de déformation totale, trouver le nouvel état de contraintes et l'incrément de variables internes. Les variables à considérer sont donc : (i) la déformation élastique ou la déformation plastique macroscopique, (ii) les tenseurs d'écroutissage intergranulaire $\underline{\beta}^g$ (autant qu'il y a de grains), (iii) les variables d'écroutissage intragranulaires isotropes q_s et ρ_s , et les variables d'écroutissage intragranulaires cinématiques α_s (autant qu'il y a de systèmes de glissement). Le seul problème à résoudre est donc le stockage des valeurs courantes et des valeurs en début d'incrément de ces variables, qui s'effectue en mémoire si la machine le permet, ou bien sur fichier temporaire. Afin de fixer les idées, pour une microstructure de type CFC avec 12 systèmes de glissement par grain, représentée par N grains, le nombre de variables sur chaque point d'intégration est donc de $42N+6$ si toutes les variables sont introduites, et de $30N+6$ si, en exprimant explicitement les variables q_s et ρ_s en fonction de v_s , il ne figure plus qu'une seule variable isotrope par système. Dans ce dernier cas, l'introduction de 40 grains conduit à 1206 variables internes, ce chiffre pouvant monter à 10000 pour le cas où l'on souhaite représenter une texture cristallographique avec un nombre d'orientations raisonnable.

Dans le cadre de la formulation en déplacements utilisée dans le code de calcul par éléments finis, l'écriture des équations d'équilibre, qui est effectuée à la fin de chaque incrément, nécessite de calculer en chaque point de Gauss la contrainte à cet instant et de suivre l'évolution des variables internes $Y = (y_1, y_2, \dots, y_p)$. Il faut donc résoudre un système d'équations différentielles de la forme $\dot{Y} = F(Y, t)$ avec les conditions initiales $Y(t_0) = Y_0$ et l'une des techniques les plus simples à mettre en

œuvre est l'utilisation de méthodes explicites. Pour qu'elles restent efficaces numériquement, il est indispensable de leur associer un contrôle de pas automatique, afin de conserver un bon compromis coût-précision. Les méthodes de Runge-Kutta explicites et emboîtées [CRO 89] sont sans doute les schémas d'intégration les plus simples respectant ces critères. Leur principe est d'associer deux schémas d'intégration d'ordre différent pour estimer une erreur de discrétisation au cours de l'intégration et d'utiliser cette estimation pour contrôler le pas de temps en fonction d'une précision requise. En fonction de l'ordre d'intégration choisi, plusieurs algorithmes sont disponibles et le schéma retenu dans le code ZéBuLoN est une méthode d'ordre deux. Soit Δt l'incrément de temps imposé au niveau de la résolution globale, on note Y^t les valeurs des variables internes connues à l'instant t du début de l'incrément. Le calcul de ces variables à l'instant $t+h$ s'effectue selon le schéma suivant :

$$Y^{t+h} = Y^{(2)} \quad \text{si le critère de précision est satisfait avec} \quad [5a]$$

$$Y^{(2)} = Y^t + (h/2) [F(Y^t, t) + F(Y^{(1)}, t+h)] \quad \text{avec} \quad Y^{(1)} = Y^t + h F(Y^t, t) \quad [5b]$$

La différence entre $Y^{(2)}$ et $Y^{(1)}$ fournit une estimation de l'erreur de discrétisation et permet de contrôler la taille du pas de temps h qui est initialisé à Δt pour la première tentative. On dispose ainsi naturellement de la possibilité d'introduire des sous-pas locaux indépendants de l'incrément global pour intégrer, avec une meilleure précision, l'évolution des variables internes aux points de Gauss où la non linéarité du comportement est la plus significative. Cette méthode pour implanter des relations de comportement dans un code de calcul par éléments finis est très générale et sa souplesse d'utilisation est essentielle pour permettre un développement rapide de nouveaux modèles de comportement. Elle a déjà été mise en œuvre pour de nombreuses applications (comportement thermo-métallurgique, matériaux biphasés, monocristaux, ...).

La méthode de Runge-Kutta se justifie pleinement en raison du grand nombre de variables : il semble en effet difficile d'envisager la résolution du système à plusieurs milliers d'équations qui résulterait de l'utilisation de la méthode de Newton à l'étape locale. La contrepartie de cette simplicité est que la méthode ne fournit pas de matrice tangente pour l'étape globale du calcul. Cette difficulté est contournée par l'utilisation d'une méthode B.F.G.S. initialisée à partir de la matrice d'élasticité. Cette technique, qui de toutes façons devient préférable pour les gros calculs 3D, permet d'obtenir la solution de l'équilibre global en quelques itérations de plus seulement que les méthodes de Newton ou quasi-Newton.

Dans les calculs qui ont été réalisés pour cette étude, la résolution globale est pratiquement négligeable par rapport à l'étape locale, y compris pour le calcul sur le maillage tridimensionnel (quelques pourcents du temps CPU total). Cette situation, pour le moins inhabituelle dans le cas de calcul de structure avec des relations de comportement élémentaires, souligne bien l'intérêt de soigner le traitement numérique du système différentiel.

4. Analyse des règles de localisation par éléments finis

4.1. Les hypothèses de calcul

Le fait d'avoir implanté un modèle polycristallin dans un code de calcul de structure donne maintenant l'occasion de vérifier son degré d'approximation, en appréciant la cohérence obtenue lorsqu'une phase correspondant à une orientation cristallographique particulière est placée en position d'inclusion dans le milieu polycristallin. En suivant la démarche de l'approche auto-cohérente à un site, il est alors possible d'analyser la réponse mécanique de cette inclusion, et de vérifier si elle est en bon accord avec celle qui est prévue par la règle de localisation du modèle de polycristal [PIL 94b].

Dans un premier temps, ces analyses ont été réalisées avec des hypothèses permettant de conduire des calculs axisymétriques (élasticité isotrope, texture "isotrope" avec 40 orientations [PIL 90b], inclusion sphérique avec des orientations cristallographiques adaptées). Il est donc possible de comparer l'évolution des champs mécaniques dans l'inclusion avec celle obtenue avec le modèle polycristallin et ainsi de pouvoir juger du degré de cohérence de la règle de localisation retenue.

Le travail effectué a consisté à valider la règle de localisation proposée et à la comparer avec la règle de Berveiller et Zaoui [BER 79], qui fait référence en plasticité sous chargement proportionnel. On a pour cela choisi un comportement local viscoplastique, mais pratiquement insensible à la vitesse de déformation. Les coefficients sont donnés dans le tableau 2 (avec $E=200$ GPa, $\mu=80$ GPa et une matrice d'interaction diagonale $h_{rs}=\delta_{rs}$). La sensibilité à la vitesse de déformation peut être estimée en calculant la variation de la partie visqueuse $k(\dot{\gamma})^{1/n}$ par rapport à la limite initiale d'écoulement τ_0 . Pour une variation de deux ordres de grandeur de la vitesse de glissement (de 10^{-4} s $^{-1}$ à 10^{-2} s $^{-1}$), ce terme passe de 25 à 32 MPa, ce qui, ramené à la limite d'écoulement à 10^{-3} s $^{-1}$, ne représente qu'une variation de $\pm 3\%$. Deux calculs de type inclusion ont été réalisés, le premier avec une inclusion dont la direction (001) est parallèle à l'axe de symétrie, le second avec une inclusion dont la direction (111) est parallèle à l'axe de symétrie. Pour une sollicitation de traction suivant l'axe z, ces deux orientations permettent de considérer pratiquement les deux cas extrêmes au niveau de l'hétérogénéité intergranulaire, puisque la première configuration conduit à une phase molle alors que la seconde conduit à une phase dure. Plusieurs maillages ont été utilisés pour optimiser le rapport coût-précision et la majorité des calculs ont été réalisés avec le maillage de la figure 1a. Il comporte 80 éléments isoparamétriques à interpolation quadratique (12 triangles et 68 quadrilatères) avec intégration réduite. Les conditions aux limites appliquées sur la frontière correspondent à une sollicitation homogène de traction uniaxiale suivant l'axe z avec une vitesse de déformation de 10^{-3} s $^{-1}$.

Pour chaque calcul, on retrouve numériquement la quasi-uniformité des champs mécaniques dans l'inclusion. Cette géométrie d'inclusion permet de déduire, sans opération de moyenne, l'évolution des champs mécaniques dans la phase, si bien que les résultats peuvent être directement comparés avec ceux du modèle polycristallin.

Ces derniers sont obtenus à l'aide du code SiDoLo, en simulant le comportement de l'élément de volume sous la même sollicitation extérieure, et en observant la réponse de l'orientation considérée. Notons que l'approche par élément fini permettra à l'avenir de généraliser ce type de calcul à des motifs de forme plus complexe.

r_0	Q_1	b_1	Q_2	b_2	c	d	M	m	k	n
100	50	10	0	/	3000	0	∞	/	40	20

Tableau 2. Coefficients du modèle utilisés pour les simulations (unités : MPa, s)

4.2. Les résultats obtenus

Les premiers résultats ont été obtenus sous sollicitation monotone avec, pour le comportement du milieu homogène équivalent, un modèle utilisant la règle de localisation de Berveiller et Zaoui (éq. [6]). Les figures 1b et 1c comparent, pour les deux phases, le calcul par éléments finis et la simulation avec le modèle polycristallin. Sur la figure 1b sont reportées les évolutions de la déformation plastique dans chaque phase et celle de la déformation plastique moyenne en fonction de la déformation totale imposée. La figure 1c illustre le comportement individuel de chaque phase et le comportement moyen de l'agrégat polycristallin. On peut noter le très bon accord entre ces deux calculs, ce qui justifie le bien-fondé, en sollicitation monotone, de cette règle de localisation approchée. On peut cependant noter sur la figure 1a l'hétérogénéité de la déformation plastique équivalente au voisinage de l'inclusion. En conséquence, la valeur du paramètre α de l'équation [6] utilisée dans l'analyse par éléments finis n'est pas uniforme dans le milieu homogène équivalent contrairement à l'hypothèse classiquement adoptée dans la démarche auto-cohérente proposée par Hill [HIL 65]. On perçoit ici tout l'intérêt d'utiliser les possibilités offertes par la simulation numérique afin de mieux appréhender la distribution spatiale des déformations plastiques locales qui accommodent les incompatibilités intergranulaires.

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\Sigma}} + \alpha \mu (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{e}}^p) \quad \text{avec} \quad 1/\alpha = 1 + \{ (3/2) \mu \parallel \underline{\underline{E}}^p \parallel / J_2(\underline{\underline{\Sigma}}) \} \quad [6]$$

Pour la règle de localisation proposée (éq. [4a] et [4h]), on obtient, pour la sollicitation monotone, des résultats équivalents à ceux obtenus par la règle de l'équation [6] en affectant aux coefficients de l'équation d'évolution des variables $\underline{\underline{\beta}}^g$ les valeurs $D=254$ et $\delta=0,159$. Mais il est dans ce cas possible d'effectuer le même type d'analyse sous une sollicitation uniaxiale de traction-compression cyclique. La figure 1d, qui illustre cette comparaison sur le comportement individuel de chaque phase, permet d'apprécier, au moins pour les deux orientations retenues dans les

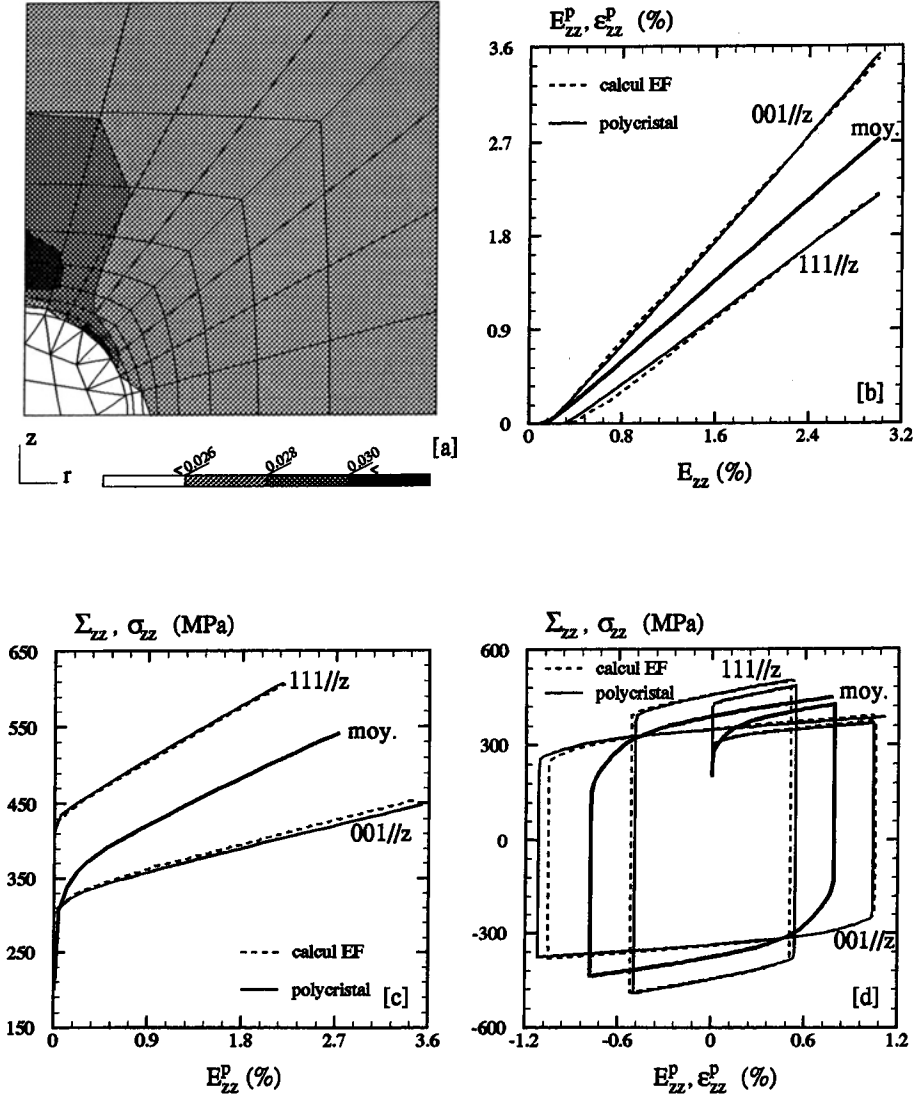


Figure 1. Évaluation par éléments finis des règles de localisation : règle de Berveiller et Zaoui (éq. [6]) en a, b, c; règle proposée dans ce travail (éq. [4a]) en d

[a] Maillage utilisé et distribution de $\|\underline{\underline{E}}^P\|$ à $E_{zz}=3\%$ (111//z)

[b] Comparaison des déformations plastiques pour chaque phase

[c] Comparaison du comportement local pour chaque phase

[d] Comparaison du comportement local pour chaque phase en cyclique

calculs, la bonne approximation de la règle de localisation proposée. Pour confirmer ces premiers résultats encourageants, il sera nécessaire de poursuivre la confrontation avec des inclusions d'orientation cristallographique différente mais qui nécessiteront des analyses par éléments finis tridimensionnelles.

5. Calculs de structures

5.1. Disque soumis à une force centrifuge

5.1.1. Méthodologie

La structure étudiée est un disque d'essai conçu par Snecma qui sert de référence pour l'étalonnage de relations de comportement cycliques depuis une dizaine d'année [CHA 85]. Il est constitué d'Inco718, la température de l'essai est de 650°C. Les détails du calcul sont dans [LEG 94]. Le disque est mis en rotation, la sollicitation est purement mécanique et provient de la force centrifuge. L'un des problèmes posés par une telle structure consiste à atteindre l'état mécanique stabilisé : plusieurs approches ont été mises en œuvre, par sauts de cycle [LES 89], ou à l'aide d'une méthode "à grands incréments de temps" [ART 94]. Mais il n'en reste pas moins que l'état asymptotique obtenu va dépendre étroitement du modèle de comportement utilisé. Il se trouve que ce cas de charge est intéressant, car, le chargement global étant ondulé, il se produit sur certains points de la structure des redistributions de contraintes qui sont très dépendantes de la manière dont le modèle efface les contraintes moyennes dans un essai sous chargement non symétrique en déformation imposée. Il est raisonnable de faire confiance au modèle cristallographique dans ce cas, car il s'est montré capable de représenter correctement les phénomènes de rochet, et que, contrairement aux modèles macroscopiques classiques, il peut présenter en fonction des niveaux atteints, de l'accommodation élastique, un rochet permanent, ou même une boucle contrainte-déformation ouverte sans qu'il y ait de rochet [PIL 90b].

L'étude a donc consisté (i) à identifier le modèle polycristallin sur des données expérimentales sous chargement cyclique à déformation imposée, en contrainte imposée, et en fluage, (ii) à identifier un modèle macroscopique sur les résultats du modèle polycristallin, de manière à avoir des modèles équivalents en traction-compression, (iii) à comparer les réponses sur la structure.

Le modèle de comportement macroscopique choisi est un modèle classique (tableau 3), répondant au critère de von Mises (éq. [7a]), muni de deux variables cinématiques non linéaires (éq. [7c]), qui se combinent en une contrainte interne \underline{x} en éq. [7d], et d'une variable isotrope qui représente (avec $Q < 0$) l'adoucissement cyclique (R dans l'éq. [7d]). Comme souvent en viscoplasticité, l'intensité de l'écoulement est donnée par une fonction puissance (éq. [7b]).

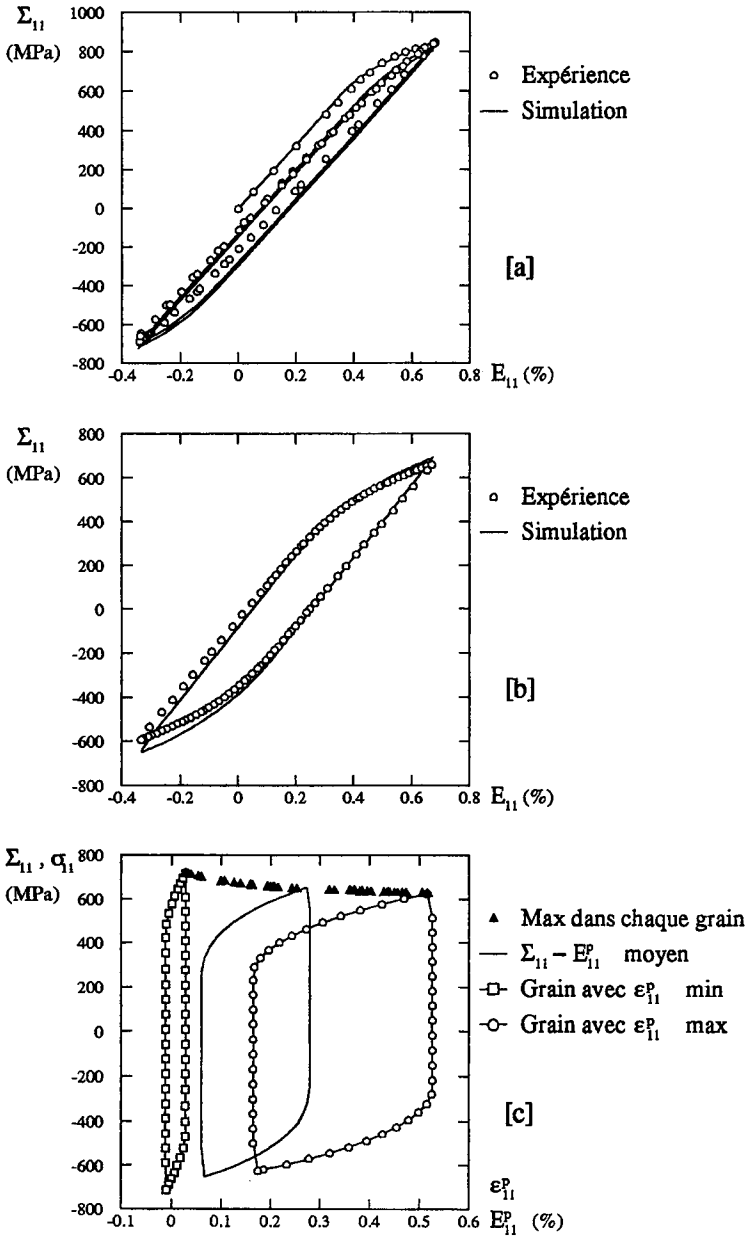


Figure 2. Simulation sur l'Inco718, modèle polycristallin ($-0.35\% < \epsilon < 0.65\%$)
 [a] Réponse globale au premier cycle
 [b] Réponse globale au cycle stabilisé
 [c] Réponse locale de chaque grain, illustration de l'hétérogénéité

Les coefficients des deux modèles sont fournis dans le tableau 4. Il faut noter que le rapport entre les limites d'élasticité initiales du modèle macroscopique et du modèle polycristallin se situe entre 2 et 3, ce qui est à rapprocher des rapports contrainte macroscopique/cission du modèle statique et du modèle de Taylor. La même remarque reste valide pour tous les coefficients homogènes à une contrainte. Par contre les exposants et les termes contrôlant les transitoires sont les mêmes sur les deux modèles. Dans le cas du modèle cristallographique, le fait qu'il y ait deux couples de coefficients (Q , b) permet de marier un durcissement qui se sature très rapidement ($Q_2 > 0$ et b_2 élevé), avec un adoucissement qui s'installe progressivement ($Q_1 < 0$ et b_1 petit). Tous les termes de la matrice d'interaction de l'équation [4c] ont été choisis égaux à 1.

La figure 2 illustre la bonne concordance entre théorie et expérience. On y constate que le modèle représente correctement l'ouverture du cycle liée à l'adoucissement cyclique entre le premier cycle (fig. 2a) et le cycle stabilisé (fig. 2b). Le modèle parvient également à prévoir correctement cette ouverture dans le cas des essais à force imposée, cette fois-ci dans des conditions plus difficiles, puisque le premier cycle est pratiquement élastique. La figure 2c rappelle quant à elle que les modèles cristallographiques fournissent également une information sur l'hétérogénéité de déformation selon chaque orientation, qui peut être mise à profit pour l'étude de l'endommagement du matériau [LEG 94].

5.1.2. Résultats

La figure 3a montre le maillage qui a été utilisé pour le disque. Il comporte 167 éléments triangulaires à interpolation quadratique et 6 points de Gauss. La structure est symétrique par rapport au plan $z=0$, et la surface extérieure est libre. Cinquante cycles ont été calculés avec le modèle polycristallin, et une centaine avec le modèle macroscopique. Les deux zones sensibles de la pièce sont l'alésage et le col, dans lesquelles, avec les deux modèles, on observe des plastifications importantes et des redistributions de contrainte.

$$F(\underline{\sigma}, \underline{x}, R) = J_2(\underline{\sigma} - \underline{x}) - R - R_0 \quad \text{avec} \quad J_2(\underline{\sigma} - \underline{x}) = \sqrt{(3/2) (\underline{\sigma} - \underline{x})^d : (\underline{\sigma} - \underline{x})^d} \quad (7a)$$

$$\underline{\dot{\epsilon}}^p = \dot{p} \underline{n} \quad \text{avec} \quad \dot{p} = [\text{Max}\{0; (F/K)\}]^n \quad \text{et} \quad \underline{n} = (\partial F / \partial \underline{\sigma})^d \quad (7b)$$

$$\underline{\dot{\alpha}}_1 = \underline{\dot{\epsilon}}^p - D_1 \underline{\alpha}_1 \dot{p} \quad ; \quad \underline{\dot{\alpha}}_2 = \underline{\dot{\epsilon}}^p - D_2 \underline{\alpha}_2 \dot{p} \quad ; \quad \dot{q} = \dot{p} [1 - bq] \quad (7c)$$

$$\underline{x} = (2/3) [C_1 \underline{\alpha}_1 + C_2 \underline{\alpha}_2] \quad ; \quad R = bQq \quad (7d)$$

Tableau 3. Résumé des équations du modèle macroscopique

polyc.	k	n	r_0	c	d	D	Q_1	b_1	Q_2	b_2
	270	16	133	31000	175	421	-80	12	10	1200
macro.	K	n	R_0	C_1	D_1	C_2	D_2	Q	b	
	636	16	317	88300	213	28800	552	-242	12	

Tableau 4. Coefficients des modèles macroscopique et polycristallin pour l'Inco718 (unités : MPa, s) - Coefficients d'élasticité : $E=164,4$ GPa, $\nu=0,3$)

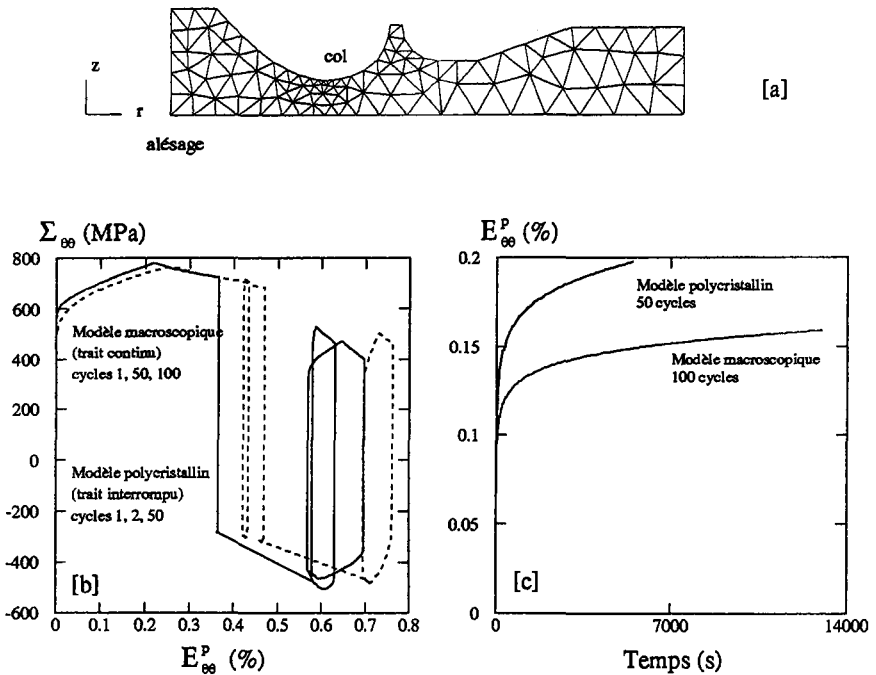


Figure 3. Calculs par éléments finis sur un disque polycristallin

[a] Maillage utilisé

[b] Contrainte-déformation plastique (composante orthoradiale) à l'alésage

[c] Illustration du rochet au niveau du col

La figure 3b montre les réponses des deux modèles sur un point de Gauss situé au niveau de l'alésage. Dans les deux cas, la déformation plastique maximale atteinte est de l'ordre de 0,8%. Le modèle macroscopique possède néanmoins un cycle stabilisé plus large, et qui est symétrique en contrainte, ce qui correspond à une réponse classique pour ce type d'approche. Le modèle polycristallin, de son côté, n'a

pas complètement relaxé sa contrainte moyenne. Cela est dû en partie au fait que sa stabilisation n'est pas complètement achevée. Mais par ailleurs, il ne faut pas oublier que la stabilisation de ce type de modèle ne se juge pas sur la boucle macroscopique, mais au niveau des systèmes de glissement [LEG 92], qui, en raison du caractère tridimensionnel du champ de contrainte dans les grains, sont les seuls à se stabiliser en cissons symétriques. Une autre illustration de la différence entre les deux modèles est donnée en figure 3c. On y constate que le modèle polycristallin prévoit plus de rochet que le modèle phénoménologique au niveau du col.

5.2. Éprouvette entaillée prélevée dans une tôle texturée

5.2.1. Identification de la loi de comportement

Le matériau étudié est un alliage d'aluminium 7475 T7351, fourni sous forme de tôle épaisse [ACH 94a]. Le laminage donne à cette tôle une texture prononcée, qui comporte une composante de type laiton $\{110\}\langle 112\rangle$ et une très faible composante de type cube $\{001\}\langle 100\rangle$. L'encart de la fig. 4 montre la figure de pôles (111) reconstruite à l'aide de la fonction de distribution des orientations cristallines utilisée dans le modèle polycristallin. Il y a 423 orientations, la taille de chaque point est proportionnelle à la fraction volumique de l'orientation correspondante. L'anisotropie de déformation plastique est mesurée sur des éprouvettes lisses à l'aide de 6 essais de traction simple à vitesse de déformation imposée de $0,005 \text{ s}^{-1}$ (sens long L, travers T, travers court S, et à 45° de chacun de ces axes dans les plans LT, TS et SL). L'évolution des coefficients de Lankford en fonction de la déformation plastique axiale est mesurée par deux capteurs diamétraux positionnés à 90° l'un de l'autre. Leurs valeurs se stabilisent entre 0,5 et 1,5 pour les cas L, T, S, LT. Par contre pour les directions TS et SL, la déformation diamétrale s'effectue pratiquement selon une seule direction, si bien que les valeurs stabilisées des coefficients peuvent atteindre 6 à 8. Deux approches ont été choisies pour représenter le comportement de ce matériau, le modèle polycristallin, et, à titre de comparaison, un modèle macroscopique utilisant le critère de Hill. Ce dernier modèle reprend les équations du tableau 4, si ce n'est qu'il faut remplacer J_2 par J_H , dont l'expression fait intervenir un opérateur du quatrième ordre constant \mathbb{H} , diagonal dans le repère de la tôle :

$$J_H(\underline{\underline{\sigma}}) = \sqrt{(3/2) (\underline{\underline{\sigma}})^d : \mathbb{H} : (\underline{\underline{\sigma}})^d} \quad [7]$$

Les coefficients décrivant la viscosité ont été déterminés de manière à reproduire la faible influence de la vitesse de déformation sur la contrainte. L'identification s'effectue sur les six essais simultanément à l'aide du code SiDoLo [PIL 88]. Dans le cas du modèle macroscopique, la deuxième variable cinématique est choisie linéaire, si bien qu'il y reste 11 coefficients à identifier, en comptant les composantes de l'opérateur \mathbb{H} . Ce nombre est réduit à 5 dans le cas du modèle polycristallin, l'effet d'anisotropie cristallographique étant naturellement prise en

compte au travers de la distribution des orientations. Les coefficients obtenus sont reportés dans le tableau 5. Les simulations menées avec ces coefficients, qui ne sont pas reportées ici, sont en bon accord avec les données expérimentales pour les deux types de modèles, dans la mesure où il y a un nombre relativement élevé de coefficients pour décrire les 6 essais. Il n'en est pas de même pour ce qui concerne les déformations diamétrales, car ces données n'ont pas été prises en compte dans la procédure d'identification. La comparaison des réponses expérimentales et des réponses simulées avec chaque modèle (fig.4) montre que le modèle polycristallin représente correctement la forte ovalisation de la section de l'éprouvette, ce qui n'est pas le cas du critère de Hill.

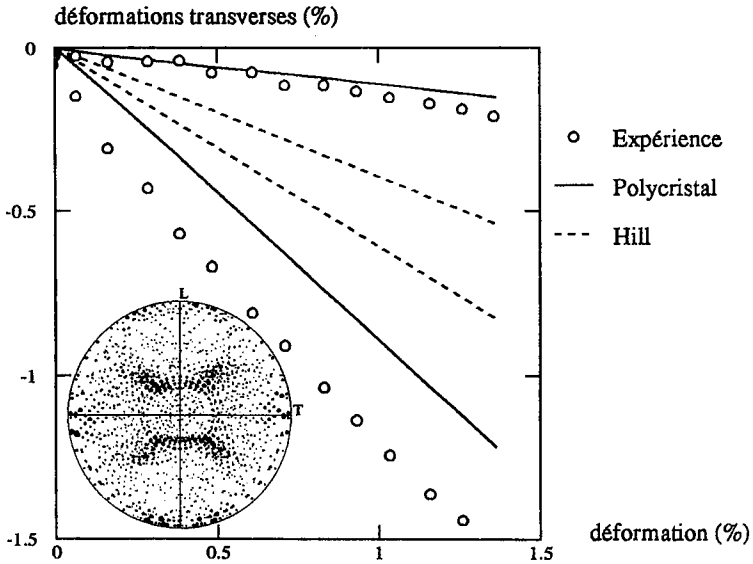


Figure 4. Prédiction des déformations transverses dans l'essai de traction suivant la direction SL. L'encart illustre la figure de pôles utilisée dans le modèle polycristallin

polyc.	r_0	c	d	D	Q_1	b_1	Q_2					
	141	135	0	29	13	89	0					
Hill	R_0	C_1	D_1	C_2	Q	b	H_L	H_T	H_S	H_{LT}	H_{TS}	H_{SL}
	435	3350	52	144	154	5,9	1	1,03	1,03	1,21	1,48	1,41

Tableau 5. Coefficients des modèles macroscopique et polycristallin pour l'alliage 7475 (unités : MPa, s) - ($E=74$ GPa, $\nu=0,34$, $n=25$, $k/3=K=40$ MPa s $^{1/n}$)

5.2.2. Calcul de structure

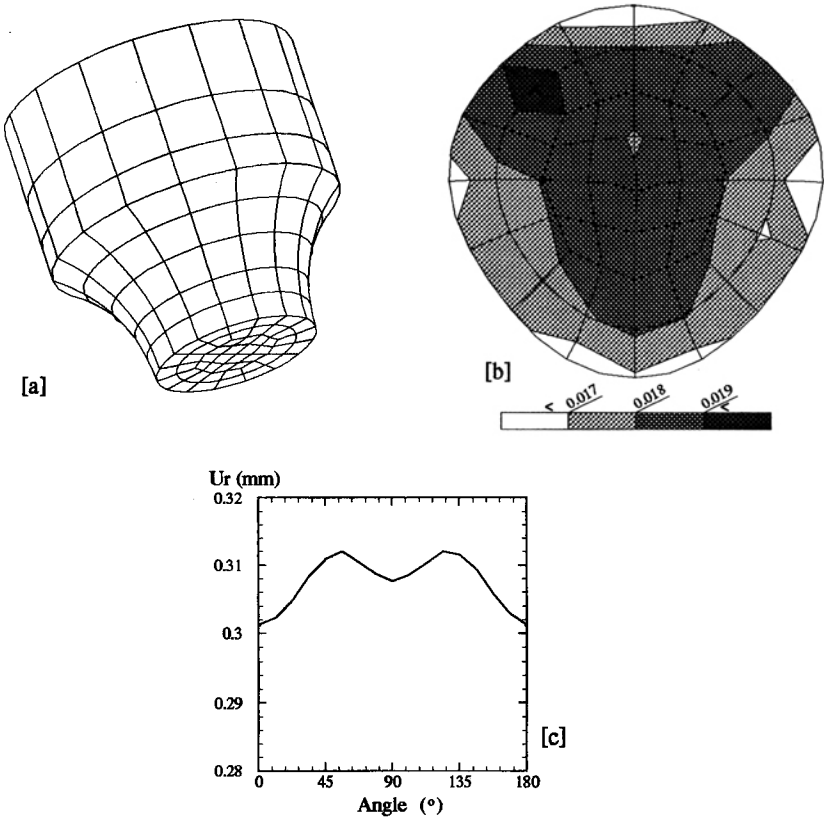


Figure 5. Calcul de structure sur une éprouvette entaillée

[a] Maillage

[b] Distribution de la déformation équivalente dans la section minimale

[c] Variation du diamètre de la section minimale en fonction de l'angle

Des calculs de structure ont ensuite été effectués pour représenter le comportement d'éprouvettes entaillées, dont la forme est illustrée sur le maillage de la figure 5a. Malgré l'absence de symétrie, et pour des problèmes liés au temps CPU sur station de travail, seule une moitié d'éprouvette est entrée dans le calcul, ce qui fait que les comparaisons ne peuvent pour l'instant être que qualitatives. Le maillage comporte 384 éléments à 20 noeuds et à intégration réduite (8 points de Gauss par élément), et 5715 degrés de liberté. En chaque point d'intégration, le matériau est représenté par les 212 orientations les plus probables (92% de la fraction

volumique), soit 6366 variables internes. Le calcul nécessite environ une semaine CPU sur une station de travail à 40 MFlops. Il montre que la distribution de déformation est loin d'être homogène au sein de la section minimale de l'éprouvette. La position de la zone de déformation maximale varie au cours du chargement entre le bord (profil élastique), puis plusieurs points situés à une distance intermédiaire entre le centre et la surface, comme illustré sur la figure 5b, enfin le centre en fin de traction. Au cas où l'on chercherait à déterminer une déformation moyenne par l'intermédiaire d'un extensomètre diamétral, la mesure obtenue varierait le long de la circonférence, puisque la section minimale prend une forme de losange aux coins arrondis (fig. 5b). La valeur de la mesure prévue par le calcul est reportée en figure 5c en fonction de la position de l'extensomètre. Sur une base de mesure de 6 mm, la déformation moyenne oscillerait donc entre 5% et 5,2%, ce qui masque en fait des zones bien plus déformées (fig. 5c).

6. Conclusion

L'utilisation des modèles polycristallins doit être encouragée pour deux raisons principales :

- après homogénéisation de toutes les contributions microstructurales, la réponse inélastique macroscopique fournie par ce genre de modèle est en général plus fiable que celle des modèles macroscopiques, en raison du caractère plus physique de la démarche suivie ;
- avant homogénéisation, les réponses locales obtenues sur chaque mécanisme fournissent une information précieuse pour la construction de modèles d'endommagement, qui doivent être basés sur des variables de l'échelle où s'amorce la rupture.

En calcul de structures, il y a deux manières d'utiliser de tels modèles :

- en *post-traitement* ; la méthode consiste alors (i) à effectuer le calcul de structure avec un modèle macroscopique classique, (ii) à isoler le ou les points qui semblent critiques en termes de contraintes ou de déformations maximales atteintes, et (iii) à utiliser l'histoire de déformation obtenue dans le premier calcul comme entrée du modèle polycristallin ; l'intérêt de cette approche est de découpler les éléments finis et le modèle polycristallin, son inconvénient est que l'histoire de déformation utilisée n'est probablement pas celle qui aurait été obtenue par le calcul complet avec le modèle polycristallin ;
- en *calcul direct* ; il s'agit alors d'utiliser directement le modèle polycristallin en éléments finis ; le présent travail montre que cette dernière solution est maintenant envisageable, y compris dans des calculs sur des géométries tridimensionnelles. Cela ne va pas sans un alourdissement très important des calculs à effectuer au niveau de chaque point d'intégration, lorsqu'il faut intégrer un système différentiel comportant plusieurs centaines ou plusieurs milliers de variables ; cependant, il y a toutes les raisons d'être optimiste de ce côté, car les tâches

correspondantes sont parallélisables sans effort, si bien que ce mode de calcul est particulièrement bien adapté aux nouvelles générations de calculateurs.

Le fait de disposer d'un code muni de relations de comportement de polycristal ouvre un grand nombre de perspectives, soit pour effectuer du calcul de structures, comme le montre la partie 5, soit, ce qui est sans doute encore plus prometteur d'un point de vue scientifique, pour vérifier la cohérence des modèles utilisés. Ainsi, en partie 4, on a pu confirmer (pour l'instant sur des orientations élémentaires) la bonne tenue de la règle de localisation à accommodation élastoplastique proposée par [BER 79]. Le modèle proposé par les auteurs est soumis à la même vérification, et les calculs confirment également que la règle d'accommodation conduit à une approximation satisfaisante. De telles vérifications devront maintenant être poursuivies, en utilisant des grains d'orientations quelconques en position d'inclusion. Le même genre d'approche peut être employé pour des matériaux biphasés, ou des matériaux où l'endommagement est présent.

7. Remerciements

Les auteurs souhaitent remercier Snecma, qui a supporté l'étude dans laquelle ont été réalisés les calculs sur le disque de turbine. Ces calculs ont été réalisés dans le cadre de la thèse de J. Legait. Ils remercient également Péchiney qui a supporté l'étude dans laquelle ont été réalisés les calculs sur l'éprouvette entaillée et plus particulièrement J.C. Ehrström qui nous a fourni les textures. Ces derniers calculs ont été effectués dans le cadre de la thèse de P. Achon, sous la direction du Professeur A. Pineau, ce qui a été l'occasion de discussions fructueuses. Merci également à O. Adam et F. Di Rienzo pour leur aide dans la réalisation de ce document.

8. Bibliographie

- [AAZ 92] AAZIZOU K., CAILLETAUD G., DIBOINE A., "Modelling of Viscoplasticity and Structural Analysis of Diesel Cyclinder Heads", *High Temperature Structural Design,ESIS12*, L.H.Larsson ed., Mechanical Engineering Publications, 1992, p. 221-242.
- [ACH 94a] ACHON P., Comportement et ténacité d'alliages d'aluminium, Thèse de Doctorat de l'École des Mines de Paris, 1994.
- [ACH 94b] ACHON P., PILVIN P., PINEAU A., EHRSTRÖM J.C., "Prévision de l'anisotropie de déformation d'alliages d'aluminium de la série 7000 à partir d'un modèle polycristallin", *La revue de Métallurgie-CIT/Science et Génie des Matériaux*, 1994, p. 1314.
- [ARM 66] ARMSTRONG P.J., FREDERICK C.O., "A Mathematical Representation of the Multiaxial Bauschinger Effect", *CEBG Report RD/BN731*, 1966.

- [ARM 87] ARMINJON M., "Théorie d'une classe de modèles de Taylor "hétérogènes" - Application aux textures de déformation des aciers", *Acta Metall.*, 35, 1987, p. 615-630.
- [ART 94] ARTZ M., Approche des phénomènes cycliques par la méthode à grands incréments de temps, Thèse de Doctorat de l'École Normale Supérieure de Cachan, 1994.
- [ASA 83] ASARO R.J., "Crystal Plasticity", *J. Appl. Mech.*, 50, 1983, p. 921-934.
- [BAT 49] BATDORF S.B., BUDIANSKY B., "A Mathematical Theory of Plasticity Based on the Concept of Slip", *NACA TN-1871*, 1949.
- [BEN 87] BENALLAL A., MARQUIS D., "Constitutive Equations for Nonproportional Cyclic Elastoviscoplasticity", *J. of Engng Mat. Tech.*, 109, 1987, p. 326-336.
- [BÉR 87] BÉRADAI C., BERVEILLER M., LIPINSKI P., "Plasticity of Metallic Polycrystals under Complex Loading", *Int. J. Plasticity*, 3, 1987, p. 143-162.
- [BER 78] BERVEILLER M., Contribution à l'étude du comportement plastique et des textures de déformation des polycristaux métalliques, Thèse de Doctorat d'État, Université Paris 13, 1978.
- [BER 79] BERVEILLER M., ZAOUÏ A., "An Extension of the Self-Consistent Scheme to Plastically Flowing Polycrystal", *J. Mech. Phys. Solids*, 6, 1979, p. 325-344.
- [BER 93] BERVEILLER M., MULLER D., KRATOCHVIL J., "Nonlocal versus Local Elastoplastic Behavior of Heterogeneous Materials", *Int. J. Plasticity*, 9, 1993, p. 633-652.
- [BRO 78] BROWN L.M., "Precipitation and Dispersion Hardening", *5ème Conf. Int. Strength of Metals and Alloys (ICSMA)*, 1978, p. 1175-1185.
- [BUI 69] BUI H.D., Étude de l'évolution de la frontière du domaine élastique avec l'écroutissage et relations de comportement élasto-plastique des métaux cubiques, Thèse de Doctorat d'État, Faculté des Sciences de l'Université de Paris, 1969.
- [BUR 91] BURLET H., CALLETAUD G., "Zébulon, a Finite Element Code for Nonlinear Material Behaviour", *Proc. of Eur. Conf. on New Advances in Computational Structural Mechanics*, Giens, France, Ladevèze P. et al eds, 1993, p. 673-680.
- [CAI 79] CALLETAUD G., CHABOCHE J.L., "Macroscopic Description of the Microstructural Changes Induced by Varying Temperature", *Proc. ICM3, Cambridge, Angleterre*, K.J. Miller, R.F. Smith eds, Pergamon, 1979, p. 23-32.
- [CAI 87] CALLETAUD G., Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux, Thèse de Doctorat d'État, Université Paris 6, 1987.
- [CAI 88] CALLETAUD G., "Une approche micromécanique du comportement des polycristaux", *Revue de Physique Appliquée*, 23, 1988, p. 353-365.
- [CAI 92] CALLETAUD G., "A Micromechanical Approach to Inelastic Behaviour of Metals", *Int. J. of Plasticity*, 8, 1992, p. 55-73.

- [CHA 79] CHABOCHE J.L., DANG VAN K., CORDIER G., "Modelization of the Strain Memory Effect on the Cyclic Hardening of 316 Stainless Steel", *Proc. Smirt 5, Section L*, Berlin, 1979, p. 79-109.
- [CHA 85] CHABOCHE J.L., CALLETAUD G., "Influence of Material Behaviour on Stress Redistribution in Cyclic Plasticity", *Int. Conf. on Num. Methods, NUMETA 85*, Swansea, J. Middleton, G.N. Pande eds, Balkema, 1985, p. 401-409.
- [CHA 89] CHABOCHE J.L., "Constitutive Equations for Cyclic Plasticity and Cyclic Viscoplasticity", *Int. J. of Plasticity*, 5, 1989, p. 247-302.
- [CHA 91] CHABOCHE J.L., "On Some Modifications of Kinematic Hardening to Improve the Description of Ratchetting Effects", *Int. J. of Plasticity*, 7, 1991, p. 661-678.
- [COM 74] COMPÈRE P., Sur les relations de comportement des métaux en viscoplasticité, Thèse de Docteur-Ingénieur, Université Paris 11, 1974.
- [CON 89] CONTESTI E., CALLETAUD G., "Description of Creep-Plasticity Interaction with non Unified Constitutive Equations. Application to an Austenitic Stainless Steel", *Nuclear Eng. and Design*, 116, 1989, p. 265-280.
- [CRO 89] CROUZEIX M., MIGNOT A.L., *Analyse numérique des équations différentielles*, Masson, 1989.
- [DEL 86] DELOBELLE P., OYTANA C., "Etude des lois de comportement à haute température en plasticité-fluage d'un acier inoxydable austénitique 17-12SPH", *J. of Nuclear Materials*, 139, 1986, p. 204-227.
- [ENG 78] ENGEL J.J., Modélisation du comportement global des métaux en plasticité et viscoplasticité, Thèse de Docteur-Ingénieur, École des Mines de Paris, 1978.
- [FEA 94] FEAUGAS X., Microstructure et modélisation du comportement en fatigue d'un alliage titane biphasé, Thèse de Doctorat de l'Université de Technologie de Compiègne, 1994.
- [FRA 85] FRANCIOSI P., "The Concepts of Latent Hardening and Strain Hardening in Metallic Single Crystals", *Acta Metall.*, 33, 1985, p. 1601-1612.
- [FRE 93] FREED A., "Viscoplasticity with Creep and Viscoplasticity Bounds", *Int. J. of Plasticity*, 9, 1993, p. 213-242.
- [HAR 76] HART E.W., "Constitutive Relations for the Non-Elastic Deformation of Metals", *J. of Engng Mat. Tech.*, 98, 1976, p. 193-203.
- [HAR 91] HARREN S.V., "The Finite Deformation of Rate Dependent Polycrystals I : a Self-Consistent Framework", *J. Mech. Phys. Solids*, 39, 1991, p. 345-360.
- [HES 93] HESS F., "Anisotropic Strain Hardening in Polycrystalline Copper and Aluminium", *Int. J. Plasticity*, 9, 1993, p. 405-420.
- [HIL 65] HILL R., "Continuum Micro-Mechanisms of Elastoplastic Polycrystals", *J. Mech. Phys. Solids*, 13, 1965, p. 89-101.
- [HUT 70] HUTCHINSON J.W., "Elastic-Plastic Behaviour of Polycrystalline Metals and Composites", *Proc. Roy. Soc.*, A319, 1970, p. 247-272.

- [KAL 92] KALINDISKI S.R., BRONKHORST C.A., ANAND L., "Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals", *J. Mech. Phys. Solids*, 40, 1992, p. 537-569.
- [KOC 66] KOCKS U.F., BROWN T.J., "Latent Hardening in Aluminium", *Acta Metall.*, 14, 1966, p. 87-98.
- [KOI 60] KOITER W.T., *Progress in Solid Mechanics*, 1, North Holland, 1960, p. 165-221.
- [KOU 91] KOUDDANE R., MOLINARI A., CANOVA G.R., "Self-consistent modelling of heterogeneous viscoelastic and elastoviscoplastic materials", *Mécamat Int. Sem. on Large Plastic Deformations, Fontainebleau, France*, C. Teodosiu, J.L. Raphanel, F. Sidoroff eds, Balkema, 1991, p. 129-141.
- [KRA 84] KRATOCHVIL J., TOKUDA M., "Plastic Response of Polycrystalline Metals Subjected to Complex Deformation History", *J. Engng Mat. Tech.*, 106, 1984, p. 299-303.
- [KRÖ 61] KRÖNER E., "Zur plastischen Verformung des Vielkristalls", *Acta Metall.*, 9, 1961, p. 155-161.
- [KRU 92] KRUCH S., "Numerical Analysis of an Engine Turbine Disk Loaded with a Large Number of Thermomechanical Cycles", *3rd Int. Conf. on Computational Plasticity, Barcelone, Espagne*, D.R.J. Owen, E. Onate, E. Hinton eds, Pineridge Press, 1992, p. 1733-1744.
- [LEG 92] LEGAIT J., PILVIN P., CAILLETAUD G., "A Description of Stress Redistribution in Polycrystalline Viscoplasticity", *12th Riso Int. Symp. on Material Science, Modelling of Plastic Deformation and its Engineering Applications, Roskilde, Denmark*, Andersen S.I. et al eds, 1992, p. 331-336.
- [LEG 94] LEGAIT J., Une approche micromécanique de l'endommagement des matériaux polycristallins, Thèse de Doctorat de l'École des Mines de Paris, 1994.
- [LEM 85] LEMAITRE J., CHABOCHE J.L., *Mécanique des matériaux solides*, Dunod, 1985.
- [LES 89] LESNE P.M., SAVALE S., "An Efficient Cycles Jump Technique for Viscoplastic Structure Calculations Involving Large Number of Cycles", *2nd Int. Conf. on Computational Plasticity, Barcelone, Espagne*, D.R.J. Owen, E. Onate, E. Hinton eds, Pineridge Press, 1989, p. 591-602.
- [LIN 57] LIN T.H., "Analysis of Elastic and Plastic Strain of FCC crystal", *J. Mech. Phys. Solids*, 15, 1957, p. 143-149.
- [MAN 65] MANDEL J., "Une généralisation de la théorie de la plasticité de W.T. Koiter", *Int. J. Solids Struct.*, 1, 1965, p. 273-295.
- [MAT 90] MATHUR K.K., DAWSON P.R., "Texture Development During Wire Drawing", *J. of Engng Mater. Technol.*, 112, 1990, p. 292-297.
- [MÉR 91] MÉRIC L., CAILLETAUD G., "Single Crystal Modeling for Structural Calculations. Part 2 : Finite Element Implementation", *J. of Engng Mater. Technol.*, 113, 1991, p. 171-182.

- [MIL 87] MILLER A.K., *Unified Constitutive Equations for Creep and Plasticity*, Elsevier, 1987.
- [MOL 87] MOLINARI A., CANOVA G.R., AHZI S., "A Self Consistent Approach of the Large Deformation Polycrystal Viscoplasticity", *Acta Metall.*, 35, 1987, p. 2983-2994.
- [MRO 87] MROZ Z., "Phenomenological Constitutive Models for Metals" in *Modelling Small Deformation of Polycrystals*, J. Gittus, J. Zarka eds, Elsevier, 1987, p. 374-410.
- [MUG 87] MUGHRABI H., "A Two-Parameter Description of Heterogeneous Dislocation Distribution in Deformed Metal Crystals", *Mat. Sci. Eng.*, 85, 1987, p. 15-31.
- [OHN 82] OHNO N. "A Constitutive Model of Cyclic Plasticity with a Nonhardening Region", *J. of Appl. Mech.*, 49, 1982, p.721-727.
- [OHN 93] OHNO N., WANG J.D., "Kinematic Hardening Rules with Critical State of Dynamic Recovery, Part I : Formulation and Basic Features for Ratchetting Behavior", *Int. J. of Plasticity*, 9, 1993, p.375-390.
- [PIL 88] PILVIN P., "Identification des paramètres de modèles de comportement", *Mécatat Int. Sem. on Inelastic Behaviour of Solids*, C. Oytana et al. eds, Besançon, France, 1988, p. 155-164.
- [PIL 90a] PILVIN P., CAILLETAUD G., "Intergranular and Transgranular Hardening in Viscoplasticity", *IUTAM Creep in Structures IV*, M. Zyczkowski ed, Cracow, Poland, 1990, p. 171-178.
- [PIL 90b] PILVIN P., *Approches multiéchelles pour la prévision du comportement anélastique des métaux*, Thèse de Doctorat de l'Université Paris 6, 1990.
- [PIL 91] PILVIN P., CAILLETAUD G., "A Micromechanic Model for Zirconium Stress-Strain Behaviour", *3th Int. Symp. on Plasticity and its Current Applications, Grenoble, France*, J.P. Boehler, A.S. Kahn eds, Elsevier, 1991, p. 164-167.
- [PIL 93] PILVIN P., LEGAIT J., CAILLETAUD G., "Finite Element Calculations with Polycrystalline Models", *Mécatat Int. Sem. on Micromechanics of Materials, Moret sur Loing, France*, Eyrolles, 1993, p. 38-47.
- [PIL 94a] PILVIN P., "The Contribution of Micromechanical Approaches to the Modelling of Inelastic Behaviour of Polycrystals", *Int. Conf. on Biaxial/Multiaxial fatigue, Paris, France, ESIS/SF2M*, 1994, p. 31-46.
- [PIL 94b] PILVIN P., *Evaluation des règles de localisation dans les modèles d'agrégats polycristallins*, Rapport interne ENSMP/CdM, 1994.
- [ROU 94] ROUGIER Y., *Etude du comportement sous irradiation : modélisation micromécanique de l'élastoviscoplasticité*, Thèse de Doctorat de l'Ecole Polytechnique, 1994.
- [SAC 28] SACHS G., "Zur Ableitung einer Fließbedingung", *Z. VDI*, 72, 1928, p. 734-736.
- [TAY 38] TAYLOR G.I., "Plastic Strain in Metals", *J. Inst. Metals*, 62, 1938, p. 307-324.

- [TRA 93] TRANCHANT F., VERGNOL J., FRANCIOSI P., " On the Twinning Initiation Criterion in Cu-Al Alpha Single Crystals", *Acta Metall. Mater.*, 41, 1993, p. 1531-1541.
- [VAD 81] VADON A., Généralisation et optimisation de la méthode vectorielle d'analyse de la texture, Thèse de Doctorat d'État, Université de Metz, 1981.
- [VAL 80] VALANIS K.C., "Fundamental Consequences of a New Intrinsic Time Measure Plasticity as a Limit of the Endochronic Theory", *Arch. Mech.*, 32, 1980, p. 171.
- [WEN 80] WENG G.J., "Constitutive Equations of Single Crystals and Polycrystalline Aggregates under Cyclic Loading", *Int. J. Engng. Sci.*, 18, 1980, p. 1385-1397.
- [YAO 85] YAO D., KREMPL E., "Viscoplasticity Theory Based on Overstress. The Prediction of Monotonic and Cyclic Proportional and Non-proportional Loading Paths of an Aluminium Alloy", *Int. J. of Plasticity*, 1, 1985, p. 259-274.
- [ZAO 70] ZAOUÏ A., Étude de l'influence propre de la désorientation des grains sur le comportement viscoplastique de métaux polycristallins (système C.F.C.), Thèse de Doctorat d'État, Faculté des Sciences de l'Université de Paris, 1970.
- [ZAO 72] ZAOUÏ A., "Effets de la désorientation des grains sur le comportement viscoplastique des polycristaux C.F.C.", *Int. J. Solids Structures*, 8, 1972, p. 1089-1101.
- [ZAO 91] ZAOUÏ A., RAPHANEL J.L., "On the Nature of the Intergranular Accommodation in the Modeling of Elastoviscoplastic Behavior of Polycrystalline Aggregates", *Mécamat Int. Sem. on Large Plastic Deformations, Fontainebleau, France, C. Teodosiu, J.L. Raphanel, F. Sidoroff eds, Balkema, 1991, p. 185-192.*
- [ZAR 68] ZARKA J., Sur la viscoplasticité des métaux, Thèse de Doctorat d'État, Faculté des Sciences de l'Université de Paris, 1968.
- [ZAR 73] ZARKA J., "Étude du comportement des monocristaux métalliques. Application à la traction du monocristal C.F.C.", *J. Mécanique*, 12, n°2, 1973, p. 275-318.