

# Physique de la déformation : les polycristaux

Sébastien Merkel  
Professeur, département de Physique  
Laboratoire UMET (Unité Matériaux et Transformations)  
sebastien.merkel@univ-lille.fr

## 6- Modélisation

## 6- Modélisation a- Conditions limites

## Sachs vs. Taylor

### Modèle de Sachs

- Tous les grains dans le polycristal voient la même contrainte ;
- Conditions d'équilibre en contraintes satisfaites aux interfaces ;
- Conditions de compatibilité (déformations) non satisfaites : apparition d'espaces et de superpositions entre les grains ;
- Chaque grain traité comme un monocristal (facteurs de Schmid...)



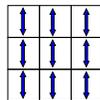
### Modèle de Taylor

- Tous les grains soumis au même état de déformation ;
- Conditions d'équilibre aux interfaces non satisfaites ;
- Conditions de compatibilité satisfaites ;
- Pas de continuité des contraintes ;
- Approprié aux polycristaux avec des conditions limites en déformation.



## Sachs vs. Taylor (2)

### Sachs Contrainte homogène



Même état de contrainte dans chaque grain



Chaque grain se déforme sur un **jeu limité de systèmes de glissement** : le système avec le facteur de Schmid maximum.

### Taylor Déformation homogène

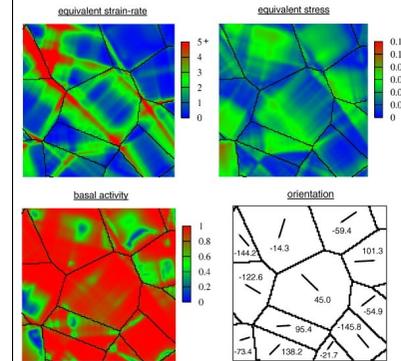
État de contrainte hétérogène



Plusieurs systèmes de glissement (5 ou plus) dans chaque grain pour assurer les conditions de compatibilité.



## Polycristal réel



Modélisation du comportement d'un polycristal de glace déformé plastiquement :

- Vitesses de déformation ;
- Contraintes ;
- Activité en glissement ;
- Orientation.

État intermédiaire entre Sachs et Taylor.  
Hétérogénéités à l'intérieur de chaque grain

Lebensohn et al, *Acta Materiala*, 2009

## Effet de la vitesse de déformation

En réalité, les lois basées sur la loi de Schmid et une transition parfaite entre le comportement élastique et le comportement plastique ne sont pas toujours adaptées.

Il y a souvent une transition douce entre le comportement plastique et le comportement élastique.

Comportement bien décrit par des lois de puissance.

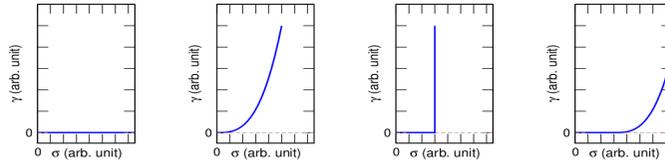
On décrit alors le comportement de chaque système de glissement par des lois du type

$$\gamma = \gamma_0 (\sigma/\tau)^n$$

Avec

- $\gamma$  : vitesse de déformation en cisaillement selon le système de glissement considéré ;
- $\sigma$  : contrainte projetée dans le plan et la direction de glissement ;
- $n$  : exposant de contrainte ;
- $\tau$  : CRSS du système considéré ;
- $\gamma_0$  : facteur de normalisation.

## Modèles de comportement



Comportement élastique :

- Pas de déformation permanente ;
- Pas de vitesse de déformation.

$$\sigma = C\epsilon$$

Comportement visco-plastique :

- Pas de domaine élastique ;
- Loi de puissance.

$$\dot{\epsilon} = A\sigma^n$$

Comportement élasto-plastique :

- Domaine élastique ;
- Contrainte seuil : CRSS ;

$$\sigma = C\epsilon \quad \begin{cases} \sigma < \sigma_c \Rightarrow \dot{\epsilon} = 0 \\ \sigma > \sigma_c \Rightarrow \dot{\epsilon} = \infty \end{cases}$$

Comportement élasto-visco-plastique :

- Domaine élastique ;
- Contrainte seuil ;
- Loi de puissance.

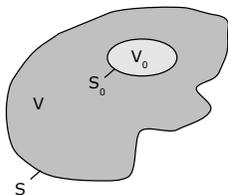
$$\begin{cases} \dot{\sigma} = f(\dot{\epsilon}) \\ \dot{\epsilon} = g(\sigma) \end{cases}$$

## Physique de la déformation : les polycristaux

# 6- Modélisation b- Problèmes d'inclusion

## Problèmes d'inclusion

Solide, de volume  $V$ , de surface  $S$ , avec pour coefficients élastiques  $C_{ijkl}$



Portion du solide, de volume  $V_0$ , de surface  $S_0$ , avec les mêmes coefficients élastiques  $C_{ijkl}$

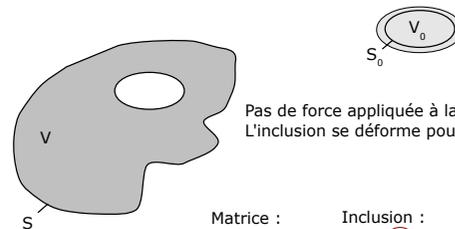
L'inclusion, de volume  $V_0$ , a subi un changement de forme ou de volume définitif (déformation plastique, changement de phase...)

La matrice, autour de l'inclusion, bloque le changement de forme ou de volume de l'inclusion : l'inclusion est sous contrainte.

Problème classique en mécanique du solide : *problème d'inclusion d'Eshelby*.

## Principe de résolution

Étape 1 : on sort l'inclusion de la matrice.



Pas de force appliquée à la matrice ni à l'inclusion. L'inclusion se déforme pour relâcher les contraintes.

Matrice :

- $\epsilon_{ij} = 0$
- $\sigma_{ij} = 0$
- $u_i = 0$

Inclusion :

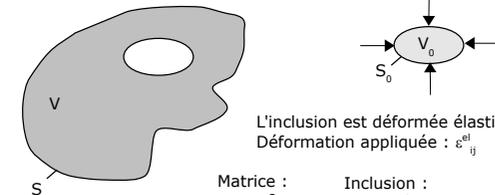
- $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^*$
- $\sigma_{ij} = 0$
- $u_i = \epsilon_{ij}^* x_j$

Déformation de l'inclusion permettant de relâcher les contraintes.

Déplacements dans l'inclusion

## Principe de résolution

Étape 2 : on applique une contrainte à l'inclusion pour lui redonner sa forme originale



L'inclusion est déformée élastiquement. Déformation appliquée :  $\epsilon_{ij}^{el}$

Matrice :

- $\epsilon_{ij} = 0$
- $\sigma_{ij} = 0$
- $u_i = 0$

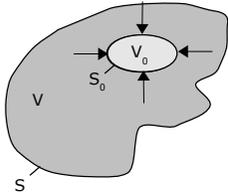
Inclusion :

- $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^{el} + \epsilon_{ij}^* = 0$
- $\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl}^{el} = -C_{ijkl} \epsilon_{kl}^* = -\sigma_{ij}^*$
- $u_i = 0$

Force appliquée à la surface de l'inclusion :  $T_j = \sigma_{ij} n_j = -\sigma_{ij}^* n_j$

## Principe de résolution

Étape 3 : on remet l'inclusion dans la matrice



L'inclusion exerce une force sur sa surface.

Cette force doit être compensée par une force appliquée par la matrice vers l'inclusion.

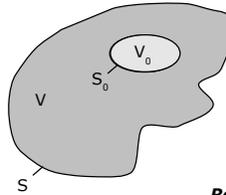
Crée une contrainte et une déformation élastique dans la matrice :  $\sigma_{ij}^c$  et  $\epsilon_{ij}^c$ .

Ajoute une contrainte et une déformation supplémentaire au sein de l'inclusion :  $\sigma_{ij}^c$  et  $\epsilon_{ij}^c$ .

Compatibilité + mêmes constantes élastiques : ces contraintes et déformations sont les mêmes dans les deux éléments.

## Principe de résolution

État final



Matrice :

$$\begin{aligned} - \epsilon_{ij} &= \epsilon_{ij}^c \\ - \sigma_{ij} &= \sigma_{ij}^c \\ - u_i &= u_i^c \end{aligned}$$

Inclusion :

$$\begin{aligned} - \epsilon_{ij} &= \epsilon_{ij}^c \\ - \sigma_{ij} &= \sigma_{ij}^c - \sigma_{ij}^* = C_{ijkl} (\epsilon_{ij}^c - \epsilon_{ij}^*) \\ - u_i &= u_i^c \end{aligned}$$

On définit enfin le tenseur d'Eshelby

$$\epsilon_{ij}^c = S_{ijkl} \epsilon_{ij}^*$$

Relation entre déformations dues à la différence de volume et déformations dues à l'interaction entre la matrice et l'inclusion.

### Résultat d'Eshelby

Pour une inclusion *ellipsoïdale*, dans une matrice homogène et infinie, le tenseur d'Eshelby est constant, donc les champs de contraintes et de déformation dans l'inclusion sont uniformes.

## Exemples de résultats

Pour une inclusion sphérique et isotrope :

$$S_{ijkl} = \frac{5\nu - 1}{15(1 - \nu)} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{4 - 5\nu}{15(1 - \nu)} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk})$$

$$S_{1111} = S_{2222} = \frac{\pi(13 - 8\nu)c}{32(1 - \nu)a}$$

$$S_{3333} = 1 - \frac{\pi(1 - 2\nu)c}{4(1 - \nu)a}$$

$$S_{1122} = S_{2211} = \frac{\pi(8\nu - 1)c}{32(1 - \nu)a}$$

$$S_{1133} = S_{2233} = \frac{\pi(2\nu - 1)c}{8(1 - \nu)a}$$

$$S_{3311} = S_{3322} = \frac{\nu}{1 - \nu} \left( 1 - \frac{\pi(4\nu + 1)c}{8\nu a} \right)$$

$$S_{1212} = \frac{\pi(7 - 8\nu)c}{32(1 - \nu)a}$$

$$S_{3131} = S_{2323} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\pi(\nu - 2)c}{4(1 - \nu)a} \right)$$

Pour une inclusion ellipsoïdale avec symétrie de révolution ( $a = b$ )

Et ainsi de suite...

Formules extraites du poly de Weinberger & Cai  
*Elasticity of Microscopic Structures*  
University of Stanford

Physique de la déformation : les polycristaux

## 6- Modélisation c- Champ moyen

## Principe

Problèmes avec simulation du comportement de polycristaux :

- État hétérogène : un polycristal réel ne se comporte ni selon la borne de Sachs, ni selon la borne de Taylor ;
- Comportement anisotrope : chaque grain de cristal est anisotrope (élasticité, systèmes de glissements...);
- Effet de la microstructure : comment prendre en compte la forme des grains, leurs tailles, leur répartition...

Solution simplifiée :

- Modèles en champ moyen ;
- Chaque grain = inclusion ellipsoïdale dans matrice homogène ;
- Solution de type Eshelby ;
- Dans chaque grain : élasticité, élasto-plastique, visco-plastique, élasto-visco-plastique...
- Matrice homogène : polycristal, moyenne des propriétés de chacun des grains.

## Implémentation classique

Los Alamos Visco-Plastic Self Consistent code (VPSC) :

- Développé par Ricardo Lebensohn et Carlos Tomé depuis le milieu des années 90 ;
- Gratuit, assez simple d'utilisation, avec manuel ;
- Fonctionne pour toutes les symétries cristallines ;
- Autres codes disponibles (Metz, Ensam Paris...).

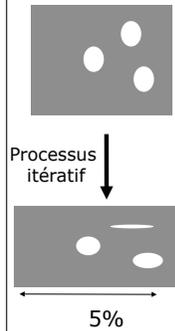
Théorie sous-jacente :

- Modèle visco-plastique : pas d'élasticité, loi de puissance entre contrainte et déformation ;
- Choix infini de systèmes de glissement ;
- Choix infini de types de déformation...

Extensions :

- EPSC : élasto-plastique
- EVPSC : élasto-visco-plastique
- ....

## Algorithme



### Paramètres :

- Mécanismes plastiques : géométrie, CRSS...
- Structure, paramètres de maille, élasticité ;
- Texture de départ (ex. 1000 grains aléatoire) ;
- Chemin de déformation.

### Modèle plastique :

- Visco-plastique, élasto-plastique, élasto-visco-plastique.

Temps de calcul  
~ minutes

### A chaque pas de déformation :

- Dans chaque grain :
  - Solution du problème d'Eshelby ;
  - Active des mécanismes de déformation, si nécessaire ;
  - Rotation du grain, équilibrage des contraintes, changement de forme ;
- Dans le polycristal :
  - Calcul des contraintes moyennes ;
  - Calcul de la texture

## Limites et qualités

### Paramètres ignorés :

- Détails de la microstructure : tailles de grain, formes précises, agencement des grains...
- Hétérogénéités au sein d'un même grain ;
- Comportement aux joints de grains.

### Qualités :

- Ne demande pas d'information inconnue (détails de la microstructure) ;
- Calculs rapides ;
- Résultats satisfaisant pour la texture ;
- Très utile pour l'interprétation de données expérimentales ou l'intégration dans des calculs à grande échelle.

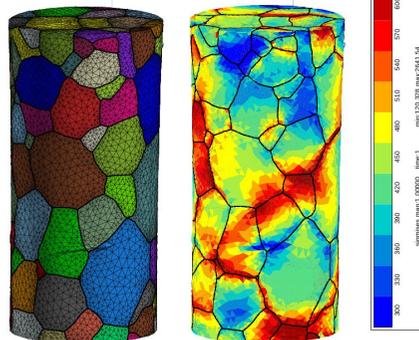
## Physique de la déformation : les polycristaux

# 6- Modélisation c- Champ complet

## FEM : illustration (1)

### Computation under tension

mesh from DCT image of ti sample with 130 grains [Ludwig et al., 2009]



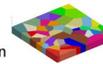
Proudhon,  
Cailletaud,  
Forest  
Mines Paris-Tech  
TD Elts Finis

## FEM : illustration (2)

### Numerical Diffraction Model

A 3 steps model (more in [Vaxelaire et al., 2010])

- Generate 3D polycrystalline model
  - 2D Voronoi cell generation in  $(x, y)$  plane
  - extrusion along  $z$  to simulate columnar grains
  - $\langle 111 \rangle$  texture with random in plane orientation
- Compute displacement field  $\mathbf{u}(x, y, z)$ 
  - Z-SeT/ZéBuLoN software suite
  - Cubic Elasticity
  - Parallel computation for large meshes
- Carry out Fourier Transform of  $\exp(i\mathbf{G}\cdot\mathbf{u}(\mathbf{r}))$ 
  - transfer  $\mathbf{u}$  field on a regular grid
  - complex FFT using fftw library [Frigo and Johnson, 2005]
  - now available as a post\_processing routine within Z-SeT



Proudhon,  
Cailletaud,  
Forest  
Mines Paris-Tech  
TD Elts Finis

## FEM : illustration (3)

### Model parameters

#### physical parameters

- 50 grains
- film dimensions:  $500 \times 500 \times 50 \mu\text{m}^3$
- cubic elasticity with  $C_{11} = 192\,340 \text{ MPa}$ ,  $C_{12} = 163\,140 \text{ MPa}$  and  $C_{44} = 41\,950 \text{ MPa}$
- gold crystal atomic spacing  $a = 0.408 \text{ nm}$

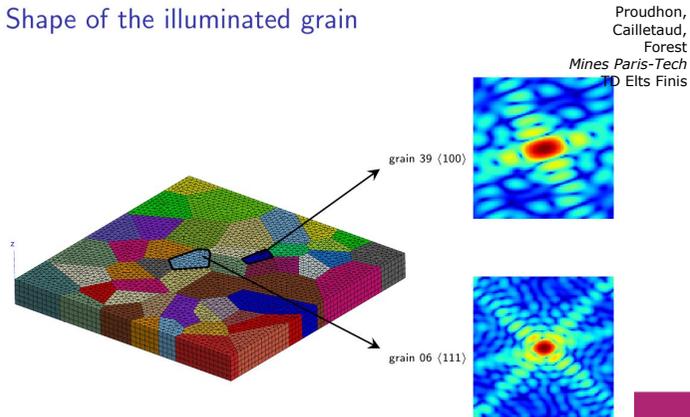
#### mesh parameters

	$m_5$	$m_3$	$m_2$	$m_1$	$m_0$
number of elements	1172	5940	27430	224410	1820200
elements in grain 06	32	93	460	3860	31290
elements in grain 39	12	45	160	1340	10880
parallel computation	no	no	no	yes	yes

Proudhon,  
Cailletaud,  
Forest  
Mines Paris-Tech  
TD Elts Finis

## FEM : illustration (4)

### Shape of the illuminated grain



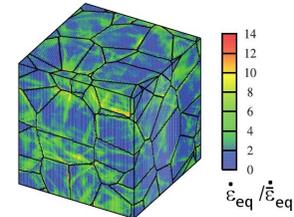
## FEM + Plasticité

A l'heure actuelle : développement de méthodes « champ complet » :

- Éléments finis ;
- Élasticité ;
- Plasticité anisotrope (systèmes de glissement, macles...)

Applications :

- Comparaison avec données expérimentales haute résolution ;
- Compréhension des mécanismes à l'échelle intra-granulaire (hétérogénéités de contraintes, de déformations) ;
- Validation et calibration de calculs en champ moyen.



Exemple : distribution des vitesses de déformation dans un polycristal d'olivine en déformation plastique

Castelnau et al, 2009