

Une loi de comportement des verres métalliques en transformation finie et son implémentation numérique

W. Wu¹, M. Blétry², H. Maitournam³, J. Neggers⁴

¹ IMSIA (Institut des Sciences de la Mécanique et Applications Industrielles), Palaiseau, wei.wu@ensta.fr

² PCM2E (Physico-Chimie des Matériaux et des Electrolytes pour l'Energie), Tours, marc.bletry@univ-tours.fr

³ IMSIA (Institut des Sciences de la Mécanique et Applications Industrielles), Palaiseau, habibou.maitournam@ensta.fr

⁴ LMPS (Laboratoire de Mécanique Paris-Saclay), Gif-sur-Yvette, jan.neggers@centralesupelec.fr

Résumé — Ce travail propose un nouveau modèle élasto-viscoplastique pour les verres métalliques, fondé sur la théorie du volume libre et intégrant un couplage mécanique-diffusion. Une formulation en grandes déformations est développée afin de reproduire les fortes localisations plastiques et l'évolution du volume libre au sein des bandes de cisaillement. L'intégration numérique est mise en œuvre dans MFront et couplée à CAST3M. Les premiers résultats en petites perturbations ayant été validés, les développements en grandes déformations font l'objet de cette communication.

Mots clés — verres métalliques, volume libre, transformation finie, viscoplasticité.

1 Introduction

Les verres métalliques sont des alliages amorphes obtenus par un refroidissement extrêmement rapide qui empêche la cristallisation. Ils suscitent un intérêt croissant pour diverses applications grâce à leurs propriétés mécaniques remarquables : très grande résistance à la rupture, forte capacité à stocker et à libérer l'énergie élastique, et limite d'élasticité élevée, comparable à celle des polymères et supérieure à celle des métaux cristallins [1].

À haute température, le comportement mécanique des verres métalliques est homogène et la déformation plastique peut atteindre des valeurs très élevées. En revanche, à basse température, le comportement devient hétérogène, marqué par l'apparition de bandes de cisaillement extrêmement fines (quelques dizaines de nanomètres) [2, 3]. Ce mode de déformation localisée dépend fortement de la température, mais aussi du taux de déformation. Au-delà d'un seuil critique (environ 800 s^{-1}), l'augmentation du taux de déformation produit un effet équivalent à une diminution de la température, qui peut rendre la réponse plus hétérogène [4].

Les modèles en petites perturbations ont été déjà étudiés pour caractériser et modéliser ce comportement hétérogène [5]. L'objectif de ce travail est de développer un modèle dans le cadre de la transformation finie, afin de reproduire les fortes localisations plastiques observées expérimentalement. Le modèle proposé repose d'une part sur la théorie du volume libre, initialement formulée par Spaepen [6] et enrichie par de Hey et al. [7], d'autre part sur un comportement élasto-viscoplastique à écrouissage isotrope et cinématique non linéaire. Il intègre également la diffusion du volume libre, ce qui permet d'introduire une longueur interne pour éviter la dépendance au maillage et contrôler l'épaisseur des bandes de cisaillement.

Il est important d'établir un modèle du comportement des verres métalliques dans le cadre de la transformation finie. D'une part, les observations expérimentales montrent que des déformations plastiques importantes (jusqu'à 80% en compression) peuvent être atteintes dans certaines configurations [8]. D'autre part, les approches en petites perturbations ne permettent pas de décrire fidèlement l'évolution géométrique de ces zones localisées, notamment la rotation des directions principales de la déformation à travers la bande de cisaillement [9]. Enfin, le cadre des grandes déformations ouvre la voie à une généralisation du modèle à d'autres matériaux sensibles à la localisation, tels que les polymères vitreux et certains composites amorphes partiellement cristallisés [10], pour lesquels l'introduction de mécanismes d'écrouissage peut s'avérer nécessaire.

La loi de comportement est implémentée dans MFront [11], qui permet une intégration locale com-

patible avec plusieurs solveurs éléments finis (EF). La résolution du couplage mécanique-diffusion est réalisée avec le logiciel CAST3M [12]. Le modèle en petites perturbations a déjà donné lieu à des résultats préliminaires [5], tandis que les simulations en grandes déformations feront l'objet de la présentation lors de la conférence.

2 Loi de comportement

2.1 Modèle en petites perturbations

Afin de décrire le comportement des verres métalliques, notamment la formation de bandes de cisaillement, un modèle tridimensionnel élasto-viscoplastique à écrouissage isotrope et cinématique non linéaire avec une loi d'écoulement de volume libre a été établi dans le cadre des petites déformations et de la température constante.

La déformation totale se décompose en deux parties :

$$\underline{\underline{\epsilon}} = \underline{\underline{\epsilon}}^e + \underline{\underline{\epsilon}}^{vp} \quad (1)$$

avec $\underline{\underline{\epsilon}}$ la déformation totale, $\underline{\underline{\epsilon}}^e$ la déformation élastique, et $\underline{\underline{\epsilon}}^{vp}$ la déformation viscoplastique.

Le comportement élastique est décrit par une loi de Hooke isotrope linéaire, de la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\epsilon}}^e = \lambda \text{Tr}(\underline{\underline{\epsilon}}^e) \mathbb{1} + 2\mu \underline{\underline{\epsilon}}^e \quad (2)$$

avec $\underline{\underline{\sigma}}$ la contrainte de Cauchy, \mathbb{C} le tenseur élastique du quatrième ordre, λ et μ les coefficients de Lamé.

Un critère de limite d'élasticité de type von Mises est choisi, la fonction de charge f a pour expression :

$$f(\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{X}}, R) = \|\underline{\underline{s}} - \underline{\underline{X}}\|_{\text{eq}} - R(p) - \sigma_0 \quad (3)$$

avec $\underline{\underline{s}} = \text{dev} \underline{\underline{\sigma}}$, $\|\underline{\underline{s}} - \underline{\underline{X}}\|_{\text{eq}} = \sqrt{\frac{3}{2}(\underline{\underline{s}} - \underline{\underline{X}}) : (\underline{\underline{s}} - \underline{\underline{X}})}$.

L'écrouissage cinématique non linéaire est donné par :

$$\underline{\underline{X}} = \frac{2}{3} C \underline{\underline{\alpha}} \quad (4)$$

tandis que l'écrouissage isotrope suit la loi :

$$R(p) = R_\infty(1 - \exp(-bp)) \quad (5)$$

Les lois d'écoulement s'écrivent :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \dot{p} \underline{\underline{n}} \quad (6)$$

$$\underline{\underline{\dot{\alpha}}} = \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^p - \gamma \underline{\underline{\alpha}} \dot{p} \quad (7)$$

avec σ_0 , C , R_∞ , b , γ les paramètres du matériau, \dot{p} la dérivée de la déformation plastique cumulée (définie telle que $\dot{p} = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}}$) et $\underline{\underline{n}}$ la direction de l'écoulement plastique normale à la surface de plasticité

$$\underline{\underline{n}} = \frac{\partial f}{\partial \underline{\underline{s}}} = \frac{3}{2} \frac{\underline{\underline{s}} - \underline{\underline{X}}}{\|\underline{\underline{s}} - \underline{\underline{X}}\|_{\text{eq}}}$$

On définit la dérivée de la déformation plastique cumulée par la loi de volume libre de Spaepen [6] :

$$\dot{p} = \dot{\epsilon}_{0c} \exp\left(-\frac{1}{x}\right) \sinh\left(\frac{f(\underline{\underline{\sigma}}, \underline{\underline{X}}, R) V_a}{2\sqrt{3} k_B T_0}\right) \quad (8)$$

avec $\dot{\epsilon}_{0c}$ le facteur de fréquence, k_B la constante de Boltzmann, T_0 la température d'essai, V_a le volume d'activation. Une variable d'état supplémentaire x est introduite pour représenter le volume libre réduit,

$$x = \frac{v_f}{\alpha v^*} \quad (9)$$

avec v_f le volume libre moyen par atome, v^* le volume libre critique et α un facteur géométrique ($0.5 \leq \alpha \leq 1$).

L'évolution de x est décrite par une équation cinétique prenant en compte la création et la relaxation structurale et la diffusion du volume libre.

$$\dot{x} = D\Delta(x) + a_x \dot{p} - k_r x^2 \left(\exp\left(-\frac{1}{x}\right) - c_{feq} \right) \quad (10)$$

avec a_x lié à la création de volume libre sous l'action de la déformation [7] et $-k_r$ lié à la relaxation structurale [13]. c_{feq} représente le taux de défauts à l'équilibre, D est le coefficient de diffusion du volume libre.

Ce modèle constitue la base de notre approche. Toutefois, les hypothèses liées aux petites perturbations limitent la capacité à décrire les fortes déformations observées. Une extension dans le cadre de transformation finie est donc envisagée, comme présenté ci-dessous.

2.2 Modèle en transformation finie

2.2.1 Préliminaires

Dans le cadre de transformation finie, la déformation élasto-viscoplastique est décrite à l'aide d'une décomposition multiplicative du gradient de déformation :

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{F}}^e \cdot \underline{\underline{F}}^p \quad (11)$$

où $\underline{\underline{F}}$ est le gradient de déformation, $\underline{\underline{F}}^e$ est la partie élastique et $\underline{\underline{F}}^p$ est la partie plastique. $\underline{\underline{F}}^p$ correspond à la transformation de la configuration initiale vers une configuration intermédiaire, tandis que $\underline{\underline{F}}^e$ représente un passage élastique de la configuration intermédiaire à la configuration actuelle.

On introduit le second tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff, défini dans la configuration intermédiaire :

$$\underline{\underline{\tilde{S}}} = J \underline{\underline{F}}^{e-1} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot {}^t \underline{\underline{F}}^{e-1} \quad (12)$$

Le tenseur de déformation logarithmique élastique est défini comme :

$$\underline{\underline{H}}^e = \frac{1}{2} \ln \underline{\underline{C}}^e = \sum_{i=1}^3 \ln(\lambda_i^e) \underline{\underline{n}}_i \otimes \underline{\underline{n}}_i \quad (13)$$

avec $\underline{\underline{C}}^e$ le tenseur de déformation de Cauchy élastique $\underline{\underline{C}}^e = {}^t \underline{\underline{F}}^e \cdot \underline{\underline{F}}^e$, qui peut également être exprimé sous forme de la représentation spectrale en bases principales $\underline{\underline{n}}_i$:

$$\underline{\underline{C}}^e = \sum_{i=1}^3 (\lambda_i^e)^2 \underline{\underline{n}}_i \otimes \underline{\underline{n}}_i \quad (14)$$

où λ_i^e sont les valeurs propres élastiques.

Le gradient de la vitesse plastique dans la configuration intermédiaire est défini par :

$$\underline{\underline{\tilde{L}}}^p = \underline{\underline{\dot{F}}}^p \cdot \underline{\underline{F}}^{p-1} \quad (15)$$

Ce tenseur peut être décomposé en une partie symétrique $\underline{\underline{\tilde{D}}}^p$ et antisymétrique $\underline{\underline{\tilde{W}}}^p$, avec

$$\underline{\underline{\tilde{D}}}^p = \frac{1}{2} (\underline{\underline{\dot{F}}}^p \cdot \underline{\underline{F}}^{p-1} + {}^t \underline{\underline{F}}^{p-1} \cdot \underline{\underline{\dot{F}}}^p) \quad (16)$$

Pour les matériaux isotropes [14], la partie antisymétrique $\underline{\underline{\tilde{W}}}^p = 0$.

L'énergie élastique associée à la déformation logarithmique s'exprime comme :

$$\Psi_e = \frac{1}{2} {}^t \underline{\underline{H}}^e : \underline{\underline{C}}^e : \underline{\underline{H}}^e \quad (17)$$

avec $\underline{\underline{C}}^e$ le tenseur d'élasticité.

La contrainte logarithmique est ainsi définie comme la force thermodynamique conjuguée à $\underline{\underline{H}}^e$:

$$\underline{\underline{T}} = \frac{\partial \Psi_e}{\partial \underline{\underline{H}}^e} = \underline{\underline{C}}^e : \underline{\underline{H}}^e \quad (18)$$

En élasticité isotrope [15], on peut considérer la relation suivante :

$$\underline{T} = \underline{\tilde{\Sigma}} \quad (19)$$

où $\underline{\tilde{\Sigma}}_s$ est la partie symétrique du tenseur de contrainte de Mandel $\underline{\tilde{\Sigma}} = \underline{C}^e \cdot \underline{\tilde{S}}$

$$\underline{\tilde{\Sigma}}_s = \frac{1}{2}(\underline{C}^e \cdot \underline{\tilde{S}} + \underline{\tilde{S}} \cdot \underline{C}^e) \quad (20)$$

2.2.2 Équations constitutives

L'énergie libre de Helmholtz est définie comme la somme de l'énergie élastique et des énergies plastiques :

$$\Psi(\underline{H}^e, \underline{\alpha}, p) = \Psi_e(\underline{H}^e) + \Psi_\alpha(\underline{\alpha}) + \Psi_p(p) \quad (21)$$

De la même manière, on reprend ici les expressions d'écoulement définies par les équations (4)-(5), et on a les relations suivantes :

$$\underline{X} = \frac{\partial \Psi_\alpha}{\partial \underline{\alpha}} \quad (22)$$

$$R = \frac{\partial \Psi_p}{\partial p} \quad (23)$$

La fonction de charge f a pour expression :

$$f(\underline{T}, \underline{X}, R) = \|\text{dev} \underline{T} - \underline{X}\|_{\text{eq}} - R(p) - T_0 \quad (24)$$

avec T_0 la limite initiale d'élasticité.

Les lois d'écoulement s'écrivent [14] :

$$\underline{\tilde{D}}^p = \dot{p} \underline{N} \quad (25)$$

$$\underline{\dot{\alpha}} = \underline{\tilde{D}}^p - \gamma \underline{\alpha} \dot{p} \quad (26)$$

$$\dot{p} = \dot{\epsilon}_{0c} \exp\left(-\frac{1}{x}\right) \sinh\left(\frac{f(\underline{T}, \underline{X}, R) V_a}{2\sqrt{3} k_B T_0}\right) \quad (27)$$

avec $\dot{p} = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\tilde{D}}^p : \underline{\tilde{D}}^p}$ et $\underline{N}^p = \frac{3}{2} \frac{\text{dev} \underline{T} - \underline{X}}{\|\text{dev} \underline{T} - \underline{X}\|_{\text{eq}}}$

L'équation cinétique du volume libre est identique à celle donnée en (10).

3 Implémentation numérique

3.1 Algorithme d'intégration en petites perturbations

3.1.1 Schéma d'intégration locale

Le schéma d'intégration implicite local consiste à résoudre les équations constitutives en chaque point de Gauss dans la simulation par EF. À partir des variables mécaniques connues $\{\underline{\sigma}_n, \underline{\epsilon}_n^e, p_n, \underline{\alpha}_n, x_n\}$ à l'instant t et d'un incrément de déformation imposé $\Delta \underline{\epsilon}$, on estime les grandeurs mécaniques à l'instant $t + \Delta t$.

En supposant l'évolution élastique, on a :

$$\Delta \underline{\epsilon}^e = \Delta \underline{\epsilon}, \Delta p = 0, \Delta \underline{\alpha} = \underline{0}, \Delta x = 0 \quad (28)$$

D'après les équations (2) et (3)

$$\underline{\sigma}_{n+1}^{el} = \mathbb{C} : (\underline{\epsilon}_n^e + \Delta \underline{\epsilon}) \quad (29)$$

$$f^{tr} = \|\underline{\sigma}_{n+1}^{el} - \underline{X}_n\|_{\text{eq}} - R(p_n) - \sigma_0 \quad (30)$$

Si $f^{tr} > 0$, la réponse est élasto-viscoplastique et le système suivant est résolu en recherchant les inconnues $\{\underline{\Delta \underline{\epsilon}}^e, \Delta p, \Delta \underline{\alpha}, \Delta x\}$, par la méthode de Newton-Raphson, selon les équations (6), (7), (8) et (10) sans le terme de diffusion $D\Delta(x)$:

$$\begin{cases} \underline{\Delta \underline{\epsilon}}^e - \underline{\Delta \underline{\epsilon}} + \Delta p \underline{n}_{n+1} & = \underline{0} \\ \Delta \underline{\alpha} - \Delta p \underline{n}_{n+1} + \gamma(\underline{\alpha}_n + \Delta \underline{\alpha}) \Delta p & = \underline{0} \\ \Delta p - \dot{\epsilon}_{0c} \exp\left(-\frac{1}{x_n + \Delta x}\right) \sinh\left(\frac{f(\underline{\sigma}_{n+1}, \underline{X}_{n+1}, R_{n+1}) V_a}{2\sqrt{3} k_B T_0}\right) \Delta t & = 0 \\ \Delta x - a_x \Delta p + k_r (x_n + \Delta x)^2 \left(\exp\left(-\frac{1}{x_n + \Delta x}\right) - c_{feq}\right) \Delta t & = 0 \end{cases} \quad (31)$$

avec les expressions suivantes : $\underline{n}_{n+1} = \frac{3}{2} \frac{\underline{s}_{n+1} - \underline{X}_{n+1}}{\|\underline{s}_{n+1} - \underline{X}_{n+1}\|_{eq}}$, $\underline{s}_{n+1} = \text{dev}(\underline{\sigma}_{n+1}) = \text{dev}(\underline{\sigma}_n + \mathbb{C} : \underline{\Delta \underline{\epsilon}}^e)$, $\underline{X}_{n+1} = \frac{2}{3} C(\underline{\alpha}_n + \Delta \underline{\alpha})$, $R_{n+1} = R_\infty(1 - \exp(-b(p_n + \Delta p)))$

3.1.2 Cas test

L'intégration locale des lois de comportement a été implémentée dans le logiciel MFront. Le calcul par EF a été effectué avec le logiciel CAST3M, dans un premier temps sans prise en compte de la diffusion.

En utilisant les paramètres identifiés par Bayard (Table 1), la courbe de comportement obtenue par l'essai de compression uniaxiale dans la direction z (Figure 1), à une vitesse de déformation de $3.125s^{-1}$, reproduit fidèlement les résultats de référence (Figure 2).

TABLE 1 – Paramètres identifiés pour la simulation [5]

E (MPa)	$\dot{\epsilon}_{0c}$ (s^{-1})	T_0 (K)	V_a (mm^3)	a_x	k_r (s^{-1})	c_{feq}	x_0
$30.3 \cdot 10^3$	$5.51 \cdot 10^9$	556	$1.26 \cdot 10^{-19}$	0.034	$6.07 \cdot 10^{11}$	$6.62 \cdot 10^{-15}$	0.0305

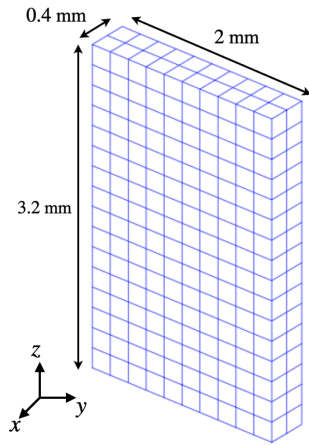


FIGURE 1 – Géométrie et maillage

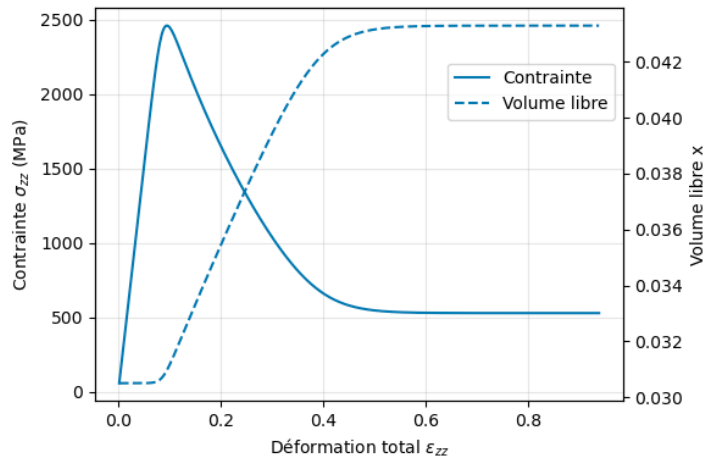


FIGURE 2 – Évolution de la contrainte et du volume libre

3.2 Algorithme d'intégration en transformation finie

De manière analogue, à partir des variables mécaniques connues $\{\underline{F}_n, p_n, \underline{\alpha}_n, x_n\}$ à l'instant t et du gradient de déformation \underline{F}_{n+1} à l'instant $t + \Delta t$, on estime les grandeurs mécaniques à l'instant $t + \Delta t$, selon un schéma d'Euler implicite.

À partir de la relation (15) sous l'hypothèse de $\underline{\tilde{W}}^p = \underline{0}$, on a [14] :

$$\underline{\dot{F}}^p = \underline{\dot{L}}^p \cdot \underline{F}^p = \underline{\dot{D}}^p \cdot \underline{F}^p \quad (32)$$

Avec l'équation (25), on peut écrire la forme de discrétisation :

$$\underline{F}_{n+1}^p = \exp(\Delta p \underline{N}_{n+1}) \cdot \underline{F}_n^p \quad (33)$$

En inversant l'équation (33), on obtient :

$$(\underline{F}_{n+1}^p)^{-1} = (\underline{F}_n^p)^{-1} \cdot \exp(-\Delta p \underline{N}_{n+1}) \quad (34)$$

que l'on multiplie par \underline{F}_{n+1} pour obtenir :

$$\underline{F}_{n+1}^e = \underline{F}_{n+1} \cdot (\underline{F}_n^p)^{-1} \cdot \exp(-\Delta p \underline{N}_{n+1}) \quad (35)$$

3.2.1 Prédiction élastique

On introduit le gradient de la déformation élastique test, noté :

$$\underline{F}_{n+1}^{e,tr} = \underline{F}_{n+1} \cdot (\underline{F}_n^p)^{-1} \quad (36)$$

alors l'équation (35) s'écrit comme :

$$\underline{F}_{n+1}^e = \underline{F}_{n+1}^{e,tr} \cdot \exp(-\Delta p \underline{N}_{n+1}) \quad (37)$$

On obtient la relation suivante selon la définition :

$$\underline{H}_{n+1}^{e,tr} = \frac{1}{2} \ln(\exp(\Delta p \underline{N}_{n+1})) \cdot \underline{H}_{n+1}^e \cdot \ln(\exp(\Delta p \underline{N}_{n+1})) \quad (38)$$

Dans le cas où $\|\underline{H}_{n+1}^{e,tr}\| \ll 1$, on adopte l'approximation suivante :

$$\underline{H}_{n+1}^e = \underline{H}_{n+1}^{e,tr} - \Delta p \underline{N}_{n+1} \quad (39)$$

En supposant une évolution élastique :

$$\begin{aligned} \underline{F}_{n+1}^{p,tr} &= \underline{F}_n^p \\ \underline{F}_{n+1}^{e,tr} &= \underline{F}_{n+1} \cdot \underline{F}_n^{p-1} \\ \underline{H}_{n+1}^{e,tr} &= \frac{1}{2} \ln(\underline{F}_{n+1}^{e,tr} \cdot \underline{F}_{n+1}^{e,tr}) \end{aligned} \quad (40)$$

Le tenseur de contrainte test obtenu via la définition (18) est :

$$\underline{T}_{n+1}^{tr} = \mathbb{C}^e : \underline{H}_{n+1}^{e,tr} \quad (41)$$

La fonction de charge F^{tr} d'après l'équation (24) :

$$F^{tr} = \|\text{dev} \underline{T}_{n+1}^{tr} - \underline{X}_{n+1}\|_{eq} - R(p_n) - T_0 \quad (42)$$

3.2.2 Correction plastique

Si $F^{el} > 0$, la réponse est élasto-viscoplastique, et le système suivant est résolu en recherchant les inconnues $\{\underline{T}_{n+1}, \Delta p, \Delta \underline{\alpha}, \Delta x\}$, à l'aide de la méthode de Newton-Raphson, selon les équations (25), (26), (27), (39) et (10) sans le terme de diffusion $D\Delta(x)$:

$$\begin{cases} \mathbb{C}^{e-1} : \underline{T}_{n+1} + \Delta p \underline{N}_{n+1} - \underline{H}_{n+1}^{e,tr} & = \underline{0} \\ \Delta \underline{\alpha} - \Delta p \underline{N}_{n+1} + \gamma(\underline{\alpha}_n + \Delta \underline{\alpha}) \Delta p & = \underline{0} \\ \Delta p - \dot{\epsilon}_{0c} \exp\left(-\frac{1}{x_n + \Delta x}\right) \sinh\left(\frac{F(\underline{T}_{n+1}, \underline{X}_{n+1}, R_{n+1}) V_a}{2\sqrt{3} k_B T_0}\right) \Delta t & = 0 \\ \Delta x - a_x \Delta p + k_r (x_n + \Delta x)^2 \left(\exp\left(-\frac{1}{x_n + \Delta x}\right) - c_{feq}\right) \Delta t & = 0 \end{cases} \quad (43)$$

avec les expressions suivantes : $N_{n+1} = \frac{3}{2} \frac{\text{dev}T_{n+1} - \underline{X}_{n+1}}{\|\text{dev}T_{n+1} - \underline{X}_{n+1}\|_{eq}}$, $\underline{X}_{n+1} = \frac{2}{3}C(\underline{\alpha}_n + \Delta\underline{\alpha})$.

Les variables internes sont ensuite mises à jour, dans le cas isotrope d'après les équations (12), (19), (20) :

$$\tilde{\underline{S}}_{n+1} = \frac{1}{2}(\underline{C}_{n+1}^e \cdot \underline{T}_{n+1} + \underline{T}_{n+1} \cdot \underline{C}_{n+1}^e) \quad (44)$$

$$\underline{\sigma}_{n+1} = \frac{1}{J_{n+1}} \underline{F}_{n+1}^e \cdot \tilde{\underline{S}}_{n+1} \cdot {}^t\underline{F}_{n+1}^e \quad (45)$$

Les développements présentés dans ce chapitre ont permis de mettre en œuvre l'algorithme d'intégration des lois de comportement en petites perturbations, validé par une première simulation uniaxiale reproduisant des résultats de référence. Parallèlement, un schéma d'intégration en grandes transformations a été établi, en cohérence avec le cadre thermodynamique présenté. Ce schéma repose sur la décomposition multiplicative du gradient de déformation, l'utilisation du tenseur de déformation logarithmique, et la résolution implicite du système couplé mécanique-volume libre.

4 Conclusion

Un nouveau modèle élasto-viscoplastique à écrouissage isotrope et cinématique non linéaire avec une loi d'écoulement de volume libre en grandes déformations a été formulé et son schéma d'intégration implicite est développé dans MFront. Par ailleurs, le modèle en petites perturbations a été validé numériquement et fournit déjà des résultats cohérents avec les comportements attendus. Le couplage mécanique-diffusion du volume libre a également été implémenté avec succès dans CAST3M, constituant une base solide pour les simulations à venir.

L'étape en cours vise à finaliser l'implémentation du schéma d'intégration en transformation finie dans MFront, ainsi qu'à l'intégration du couplage multiphysique. Des simulations numériques seront ensuite menées sur des cas tests représentatifs, afin de valider la capacité du modèle à reproduire les phénomènes de localisation plastique, l'évolution du volume libre et la formation de bandes de cisaillement. Les résultats préliminaires seront présentés lors de la conférence CSMA.

Références

- [1] M. Telford. *The case for bulk metallic glass*. Materials Today, Elsevier, 36–43, 2004.
- [2] J. Lu, G. Ravichandran, W. Johnson. *Deformation behavior of the Zr41.2Ti13.8Cu12.5Ni10Be22.5 bulk metallic glass over a wide range of strain-rates and temperatures*. Acta Materialia, Elsevier, 3429–3443, 2003.
- [3] A. Greer, Y. Cheng, E. Ma. *Shear bands in metallic glasses*. Materials Science and Engineering : R : Reports, Elsevier, 71–132, 2013.
- [4] W. L. Johnson, J. Lu, M. D. Demetriou. *Deformation and flow in bulk metallic glasses and deeply undercooled glass forming liquids—a self consistent dynamic free volume model*. Intermetallics, Elsevier, 1039–1046, 2002.
- [5] M. Bayard. *Caractérisation et modélisation du comportement dynamique des verres métalliques*. Ph.D. thesis, Institut Polytechnique de Paris, 2020.
- [6] F. Spaepen. *A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses*. Acta metallurgica, Elsevier, 407–415, 1977.
- [7] P. De Hey, J. Sietsma, A. Van Den Beukel. *Structural disordering in amorphous pd40ni40p20 induced by high temperature deformation*. Acta Materialia, Elsevier, 5873–5882, 1998.
- [8] H. Bei, S. Xie, E. P. George. *Softening Caused by Profuse Shear Banding in a Bulk Metallic Glass*. Physical Review Letters, APS, 105503, 2006.
- [9] S. Scudino, D. Şopu. *Strain Distribution Across an Individual Shear Band in Real and Simulated Metallic Glasses*. Nano Letters, ACS Publications, 1221–1227, 2018.
- [10] J.-C. Lee, et al. *Deformation-induced nanocrystallization and its influence on work hardening in a bulk amorphous matrix composite*. Acta materialia, Elsevier, 1525–1533, 2004.
- [11] T. Helfer, et al. *Introducing the open-source mfront code generator : Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform*. Computers & Mathematics with Applications, 70(5), 994–1023, 2015.

- [12] T. Charras, F. Di Paola. *Utiliser cast3m*. La procédure PASAPAS, 2011.
- [13] A. Van den Beukel, J. Sietsma. *The glass transition as a free volume related kinetic phenomenon*. Acta Metallurgica Et Materialia, Elsevier, 383–389, 1990.
- [14] M. Ganjiani, R. Naghdabadi, M. Asghari. *An elastoplastic damage-induced anisotropic constitutive model at finite strains*. International Journal of Damage Mechanics, SAGE Publications, 499–529, 2013.
- [15] M. Á. Caminero, F. J. Montáns, K.-J. Bathe. *Modeling large strain anisotropic elasto-plasticity with logarithmic strain and stress measures*. Computers & Structures, Elsevier, 826–843, 2011.