

# Simulation numérique 3D des bandes de glissement intense dans les polycristaux durcis : comparaison directe simulation / expérience

L. Gélébart<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université Paris-Saclay, CEA, SRMA, 91191, Gif-sur-Yvette France, lionel.gelebart@cea.fr

---

**Résumé** — L'objectif de l'étude est de proposer une confrontation modèle/simulation sur un jeu de données expérimental riche [3] incluant essai in-situ, HR-DIC et EBSD-3D. Afin de reproduire la forte localisation sous forme de bandes de glissement, des simulations de grande taille sont réalisées à l'aide du code FFT massivement parallèle AMITEX. Le modèle de plasticité cristalline en densité de dislocation ne reproduisant pas ces bandes, un modèle simple prenant en compte une distribution aléatoire de cisssions critiques [7], permet d'obtenir une bien meilleure représentation de ce phénomène. **Mots clefs** — polycristaux, bandes de glissement, AMITEX, FFT, Corrélation d'images numérique, INCONEL718

---

## 1. Contexte

L'homogénéisation numérique du comportement mécanique des matériaux, vise à simuler la réponse mécanique d'un agrégat polycristallin en termes de réponse macroscopique mais également de distribution spatiale de quantités locales (champ de contrainte, de déformation, déformation plastique etc... pouvant par exemple être utilisés comme données d'entrée de modèles de mécanique de la rupture ou de fatigue). Les données d'entrée sont une image 3D d'un polycristal, supposée être la plus réaliste et représentative du matériau étudié, et une loi de comportement représentative du comportement plastique du grain monocristallin.

La validation, ou le recalage de certains paramètres de la loi de plasticité cristalline, peut s'envisager assez simplement par comparaison avec des réponses macroscopiques expérimentales (sur des essais de traction uniaxiaux par exemple). En revanche, cette confrontation ne permet pas de valider la réponse locale du modèle et une démarche doit être développée afin de valider le modèle sur des champs mesurés expérimentalement révélant des hétérogénéités inter- et intra- granulaires. Initié dans les années 2000 [6] [10] [9], le développement de cette démarche est encore à ce jour un axe de recherche actif qui bénéficie des progrès continus des techniques aussi bien expérimentales que numériques.

Du point de vue numérique, le développement de codes massivement parallèles, comme le code AMITEX [8], permet d'envisager des simulations numériques avec des résolutions jusqu'ici inenvisageables pour des codes standards, généralistes, basés sur les éléments-finis (EF), dont les limites en termes de taille et/ou de temps de calcul étaient souvent atteintes.

Du point de vue expérimental, les techniques de dépôt de mouchetis à l'échelle nanométrique, associées à des techniques de corrélation d'images numériques obtenues par microscopie électronique à balayage, donnent accès à des mesures à haute résolution des hétérogénéités de déformation se développant à la surface des échantillons [1][15]. Combinées à des images EBSD 2D et désormais 3D, elles donnent accès à des jeux de données d'une grande richesse [3] auxquelles doivent se confronter les outils de simulation [5]. On pourra également signaler les techniques de diffraction-tomographie permettant d'obtenir des informations directement en volume. Ainsi, les techniques de 3DXRD ou encore de scanning 3DXRD ont été utilisées dans le cadre de la thèse de Daria Mesbah [13] [4].

Cette étude se focalise sur la simulation de la localisation de la déformation plastique sous forme de bandes de glissement intense telles qu'observées dans les matériaux durcis, par précipitation comme l'Inconel 718 [3] ou encore par irradiation comme dans les alliages de zirconium [15]. La modélisation de ce phénomène est encore une question ouverte et sa prise en compte dans les simulations nécessite une résolution spatiale très fine rendant la question inaccessible à de nombreux code EF, notamment en 3D. L'utilisation d'un code FFT parallèle permet d'envisager cette question. Deux pistes sont actuellement explorées à l'aide du code AMITEX :

- L'utilisation de comportements adoucissants dont on a pu montrer au cours de la thèse d'Aldo Marano qu'elle devait s'accompagner d'une modélisation non-locale de la plasticité cristalline (modèle à gradient) [11] [12],
- L'emploi de champs de cissions critiques hétérogènes, aléatoires par couche, visant à simuler une distribution aléatoire de sources de plasticité, proposé par l'auteur [7], qui permet également d'introduire un effet de taille de grain dans les simulations numériques de polycristaux.

L'objectif est ici d'évaluer l'aptitude de cette seconde proposition à reproduire les résultats expérimentaux, en termes de réponse macroscopique et, surtout, de champs de déformation, mis à disposition par J.C. Stinville et M.A. Charpagne (Université d'Illinois, Urbana Champaign, USA) [3].

## **2. Jeu de données expérimental [3]**

Les données mises à disposition [3] ont été obtenues à partir d'un essai de traction in-situ MEB réalisé sur une éprouvette d'INCONEL718 durci par nano-précipitation. Les données sont constituées : de la réponse macroscopique du matériau, de différentes cartographies de champs de déformation obtenues par corrélation d'images numériques à haute résolution (HR-DIC) à différents niveaux de chargement, et d'une image 3D du champ d'orientations cristallines sous-jacent obtenu par EBSD-3D après essai. L'ensemble de ces résultats est regroupé dans la figure 1. On peut remarquer sur les champs de déformation la présence de bandes de glissement intense, véritable challenge pour la simulation numérique des polycristaux.

Ce jeu de données expérimental, unique en son genre, offre la possibilité de confronter directement les champs de déformation mesurés et simulés en surface en utilisant la microstructure 3D sous-jacente.

## **3. Modèles de plasticité cristalline**

### **3.1. Modèle en densité de dislocation**

Le modèle de plasticité cristalline utilisé ici est identique à celui utilisé dans l'article [3] pour réaliser des simulations sur l'agrégat caractérisé par EBSD. Le modèle est formulé en grandes transformations, la loi d'écoulement est de type Norton, l'écrouissage de chaque système dépend des densités de dislocations sur les différents systèmes selon une matrice d'interaction, et l'évolution de la densité de dislocations obéit à une loi de Kocks-Mecking avec un terme de multiplication et un terme de restauration. La loi et les paramètres associés sont identiques à ceux décrits dans [3].

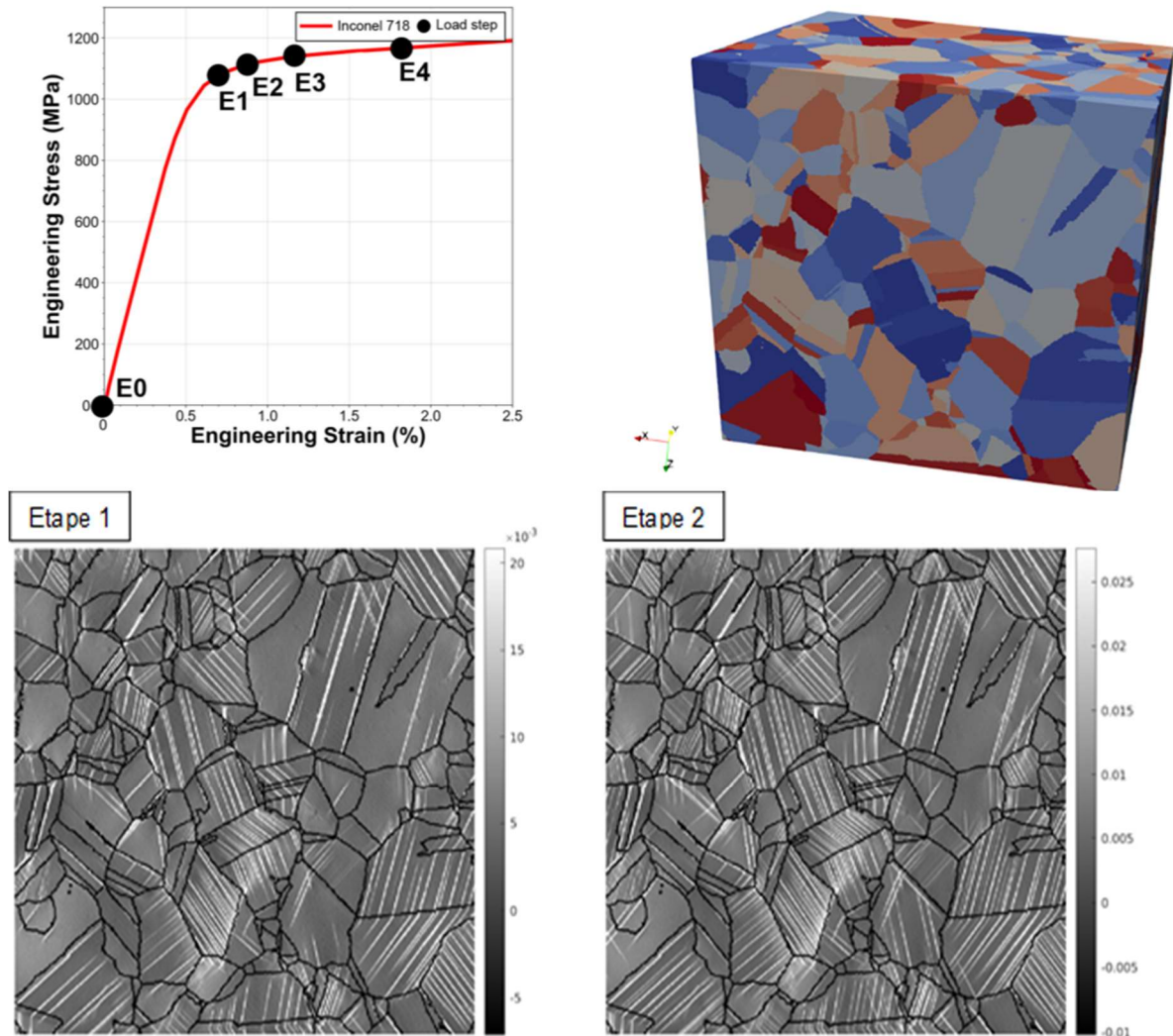


Figure 1 : réponse macroscopique (haut-gauche), cartographie 3D d'orientation cristalline obtenue par EBSD-3D (549x420x526 voxels, avec une taille de voxel de 1  $\mu\text{m}$ ) (haut-droit), champs de déformation axiale obtenus par HR-DIC, à deux étapes successives (bas) [3].

### 3.2. Modèle à cissons critiques aléatoires [7]

A l'inverse de la loi en densité de dislocation présentée ci-dessus, relativement complexe, on se propose d'utiliser une loi de plasticité cristalline très simple, sans écrouissage et quasi-indépendante du temps. Pour justifier ce choix, on insiste sur le fait que pour ces matériaux fortement durcis (ici par précipitation), les dislocations sont fortement ancrées, et que le paramètre important à considérer au premier ordre est la cisson critique permettant d'activer la plasticité.

On retient une loi d'écoulement viscoplastique de type Norton à seuil dont les paramètres  $K$  et  $n$  (10 MPa.s<sup>-1</sup> et 4) sont choisis de façon à réduire la sensibilité à la vitesse de déformation (écart relatif inférieur à 1% pour deux vitesses de sollicitation ( $10^{-2} \text{ s}^{-1}$  et  $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ) encadrant la vitesse de déformation

macroscopique utilisée dans les simulations ( $10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ). Les équations de la loi de comportement sont données ci-dessous.

$$\underline{\sigma} = \mathbf{C} : (\underline{\varepsilon} - \underline{\varepsilon}^p) \quad (1)$$

$$\underline{\varepsilon}^p = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}_s \underline{\mu}_s \quad (2)$$

$$\dot{\gamma}_s = \text{sign}(\tau_s) \left( \frac{|\tau_s| - (\tau_p + \tau_s^f)}{K} \right)_+^n \quad (3)$$

La contrainte,  $\underline{\sigma}$  est reliée à la déformation  $\underline{\varepsilon}$  et à la déformation plastique  $\underline{\varepsilon}^p$ , par la loi d'élasticité dont le tenseur de rigidité est noté  $\mathbf{C}$ . La cission  $\tau_s$  sur le système  $s$  est  $\tau_s = \underline{\sigma} : \underline{\mu}_s$  avec  $\underline{\mu}_s = (m_s \otimes n_s)^{sym}$ , où  $m_s$  et  $n_s$  sont la direction de glissement et la normale au plan de glissement. La cission critique est ici séparée en deux termes  $\tau_p$  et  $\tau_s^f$ , le premier sera considéré dans la suite comme homogène et le second fluctuant de manière aléatoire et homogène par couche. Afin de réduire les temps de simulation, la loi de comportement est ici formulée dans le cadre des petites déformations. Cette approximation semble ici raisonnable étant données les niveaux de chargement envisagés (déformation macroscopique inférieure à 1.8%).

Pour chaque système de glissement (parmi les 12 possibles de la maille CFC de l'INCONEL718), chaque grain est découpé en couches fines parallèles au plan de glissement du système. Pour chaque couche, une cission critique aléatoire est attribuée selon une loi de Weibull, selon la méthode détaillée dans [7]. Cette modélisation repose sur deux idées : les sources de dislocation activables sont réparties aléatoirement avec une contrainte d'activation également aléatoire, lorsqu'une source de dislocation s'active, en cisailant les précipités qui l'ancrent, les dislocations peuvent traverser l'ensemble du grain. La figure 2 présente deux exemples de champs de cission critique correspondant à deux systèmes de glissement (parmi les 12 à générer comme donnée d'entrée de la simulation).

On notera que ce type de modèle engendre une localisation en bandes de glissement intense, un effet de taille de grain, un phénomène de microplasticité correspondant à l'apparition de premières bandes de glissement sans effet prononcé sur la réponse macroscopique (qui demeure quasi-élastique).

On notera que ce modèle, volontairement simple, ne comprend que 3 paramètres à identifier : la cission critique homogène  $\tau_p$  et les deux paramètres de la loi de Weibull. En supposant une dépendance à la taille de grain en  $d^{-1/2}$ , l'exposant de la loi de Weibull peut être estimé. L'identification du modèle est ensuite réalisée en ajustant les deux paramètres libres sur la réponse macroscopique.

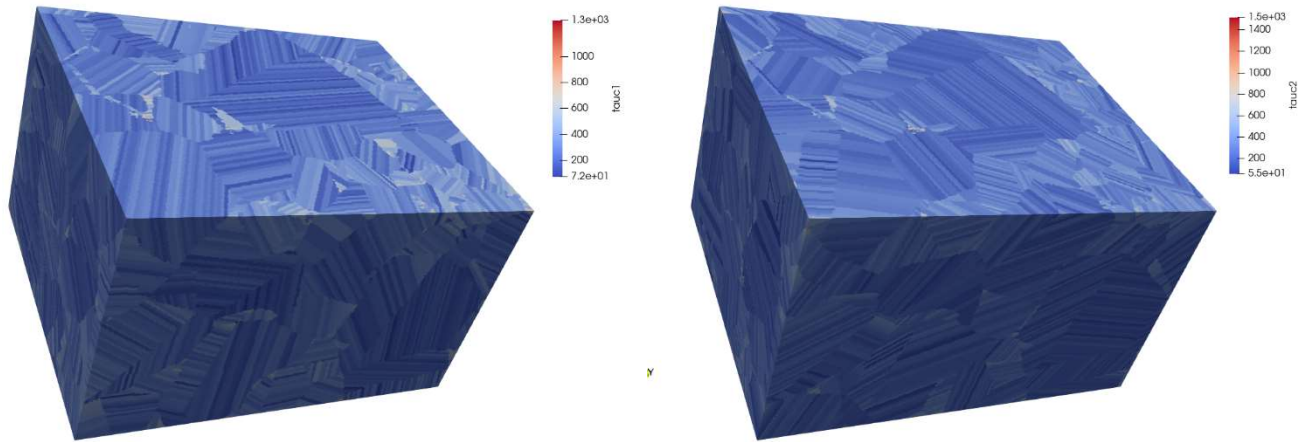


Figure 2: Exemple de deux champs de cissions critiques aléatoires par couche (parmi les 12 champs correspondant aux 12 systèmes de glissement de la maille CFC).

#### 4. Simulation et réponse macroscopique

Les simulations sont réalisées sur l'agrégat polycristallin présenté à la Figure 1, en utilisant directement le champ d'orientations cristalline mesuré expérimentale par EBSD-3D, discrétisé sous la forme d'une grille de 549x420x526 voxels (soit ~121 millions de voxels). L'utilisation d'un code FFT imposant implicitement des conditions aux limites périodiques, il est nécessaire de rajouter une couche de voxels de propriété nulle afin de représenter la condition de surface libre.

La Figure 3 propose une comparaison de la réponse macroscopique expérimentale et des réponses obtenues avec le modèle en densité de dislocation ou le modèle à cissions critiques aléatoires. On constate que les deux modèles donnent des réponses tout à fait satisfaisantes.

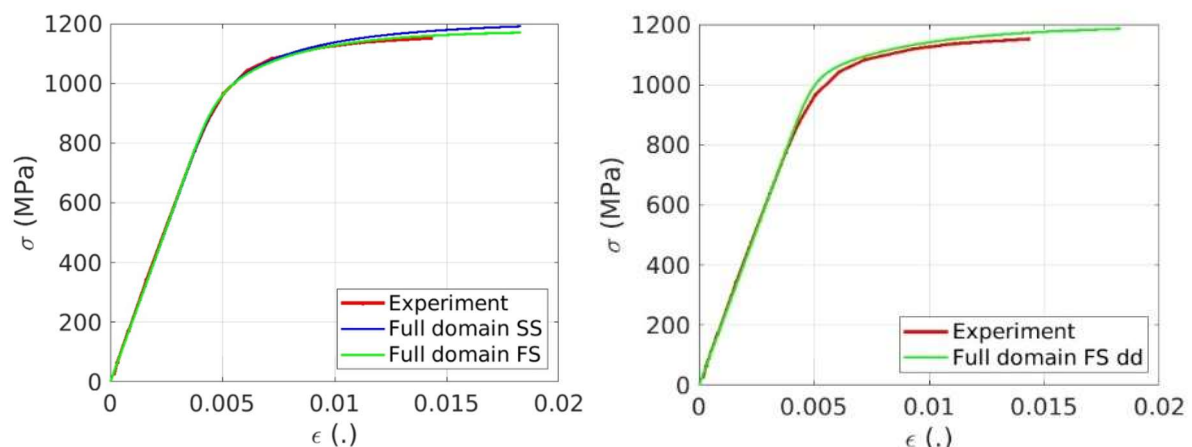


Figure 3 : Comparaison de la réponse macroscopique expérimentale (courbe rouge) à la réponse simulée avec le modèle de plasticité cristallin en densité de dislocation (courbe verte, droite), et à celle simulée avec le modèle à cissions critiques aléatoires (courbe verte, gauche). La courbe bleue obtenue sous l'hypothèse des petites perturbations illustre le faible effet de cette hypothèse pour le chargement étudié.

## 5. Champs de déformation

La comparaison directe des champs de déformation axiale mesurés et simulés, avec les deux modèles, est présentée à la Figure 4. On observe que le modèle en densité de dislocation ne présente pas de bandes de glissement intenses, contrairement au modèle à cisssions critiques aléatoires. Sur ce dernier, il est clair que pour une majorité des grains, les plans de glissement activés sont cohérents avec ceux observés expérimentalement. On peut toutefois observer des différences notables sur l'activité plastique de certains grains (entourés en rouge), plus ou moins marquée dans l'expérience que dans la simulation. On peut ajouter qu'une analyse des facteurs de Schmit maximum est en accord avec les prévisions de la simulation. Enfin, cet écart est observé de manière similaire sur le modèle en densité de dislocation. L'origine de cet écart reste une question ouverte.

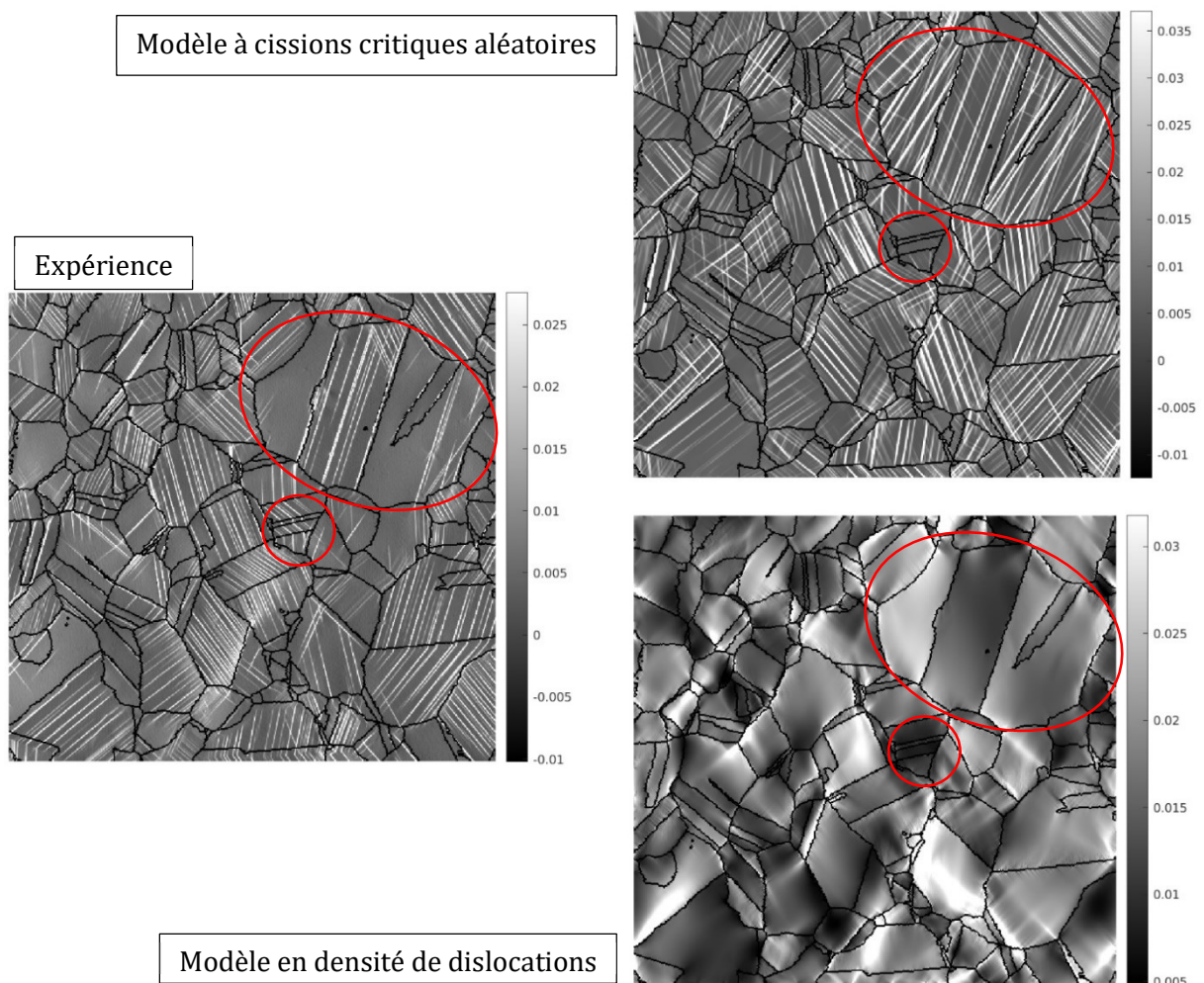


Figure 4 : comparaison des champs de déformation axiale mesurés et simulés, à l'étape de chargement 3, avec le modèle en densité de dislocation ou avec le modèle à cisssions critiques aléatoires. Pour chaque figure, l'échelle de couleur est fixée à la valeur moyenne plus ou moins deux écart-types.

## 6. Conclusion et perspectives

En conclusion, une comparaison directe entre champs de déformation mesurés en surface et champs simulés a pu être mise en œuvre à l'aide du code FFT massivement parallèle. L'utilisation d'un modèle d'inspiration physique, basé sur les densités de dislocation, utilisé dans [3], ne permet pas de reproduire les bandes de glissement intenses mises en évidence expérimentalement. Afin de mieux reproduire ces observations, un modèle simple s'appuyant sur une distribution aléatoire de cissions critiques par couche est utilisé [7]. Avec trois paramètres, dont l'un fixé sur des considérations relatives aux effets de taille de grain, et les deux autres calibrés sur la réponse macroscopique, on montre que ce modèle permet de reproduire la réponse macroscopique et fournit une bien meilleure représentation des champs de déformations mesurés. On notera toutefois l'existence d'écarts simulation/expérience sur certains grains, observés de manière similaire sur les deux modèles. L'origine de ces écarts demeure une question ouverte.

Les résultats obtenus démontrent le fort potentiel du modèle à cissions critiques aléatoires [7]. Volontairement adossé à de la plasticité parfaite, pour commencer, ce modèle pourra être enrichi par des lois de comportement prenant en compte de manière plus riche les interactions entre systèmes de glissement et d'éventuels phénomènes d'adoucissement. Par ailleurs, l'utilisation de ce modèle, et de son implémentation au sein du code AMITEX, appliquée à l'étude du comportement en fatigue est d'ores et déjà en cours dans différents laboratoires (ONERA, thèse de M. Musy—Haspel [14] et ENSTA Brest, thèse de A. Calazans [2]).

## Références

- [1] F. Bourdin, J.C. Stinville, M.P. Echlin, P.G. Callahan, W.C. Lenthe, C.J. Torbet, D. Texier, F. Bridier, J. Cormier, P. Villechaise, T.M. Pollock, and V. Valle. Measurements of plastic localization by heaviside-digital image correlation. *Acta Materialia*, 157:307 – 325, 2018.
- [2] A. Calazans. PhD thesis, ENSTA Brest, Étude et modélisation du scénario d'apparition de la microplasticité à partir de simulations éléments finis sur agrégats polycristallins.
- [3] M. A. Charpagne, J. M. Hestroffer, A. T. Polonsky, M. P. Echlin, D. Texier, V. Valle, I. J. Beyerlein, T. M. Pollock, and J. C. Stinville. Slip localization in inconel 718: A three-dimensional and statistical perspective. *Acta Materialia*, 215:117037, 2021.
- [4] Mesbah D. *Identification de lois de comportement plasticité cristalline par jumeau numérique et apprentissage statistique*. PhD thesis, Université PSL, 2025.
- [5] Protin G. *Acquisition de champs cinématiques de surface visant à évaluer la performance des simulations numériques 3D en plasticité cristalline*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2024.
- [6] L. Gélébart. *Approche multi-échelles du comportement mécanique de l'alliage TiAl48Cr2Nb2*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2002.
- [7] Lionel Gélébart. Grain size effects and weakest link theory in 3d crystal plasticity simulations of polycrystals. *Comptes Rendus. Physique*, 22(S3):313–330, 2021.
- [8] Lionel Gélébart. <https://amitexfft.github.io/amitex/index.html>. 2022.
- [9] E. Heripre, M. Dexet, J. Crepin, L. Gélébart, A. Roos, M. Bornert, and D. Caldemaison. Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials. *International Journal of Plasticity*, 23(9):1512–1539, 2007.
- [10] T. Hoc, J. Crepin, L. Gélébart, and A. Zaoui. A procedure for identifying the plastic behavior of single crystals from the local response of polycrystals. *Acta Materialia*, 51(18):5477–5488, 2003.
- [11] A. Marano, L. Gélébart, and S. Forest. Intragranular localization induced by softening crystal plasticity: Analysis of slip and kink bands localization modes from high resolution fft-simulations results. *Acta Materialia*, 175:262 – 275, 2019.
- [12] Aldo Marano, Lionel Gélébart, and Samuel Forest. Fft-based simulations of slip and kink bands formation in 3d polycrystals: Influence of strain gradient crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, page 104295, 2021.

- [13] Daria Mesbah, Henry Proudhon, Lionel Gélébart, and David Ryckelynck. Multimodal super-resolution for fast image-based simulation of crystal plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 445:118210, 2025.
- [14] M. Musy-Haspel. *Modélisation du couplage thermique-plasticité-diffusion dans les polycristaux : application à la fragilisation par l'hydrogène des alliages de nickel*. PhD thesis, Université Paris-Saclay, ONERA.
- [15] R. Thomas, D. Lunt, M.D. Atkinson, J. Quinta da Fonseca, M. Preuss, F. Barton, J. O'Hanlon, and P. Frankel. Characterisation of irradiation enhanced strain localisation in a zirconium alloy. *Materialia*, 5:100248, 2019.