

Méthodes inverses sans modèles de comportement pour la caractérisation de la plasticité de polycristaux métalliques

R. Langlois^{1,2}, J. Réthoré¹, R. Seghir¹

¹ Nantes Université, Ecole Centrale Nantes, CNRS, GeM, UMR 6183, F-44000 Nantes, France

² INSA Lyon, CNRS, LaMCoS, UMR5259, F-69621 Villeurbanne, France

Résumé — Deux méthodes inverses dédiées à l'identification de la plasticité des agrégats polycristallin sont proposées. Elles se basent toutes les deux sur un outils de régression parcimonieuse permettant l'estimation de glissements plastiques à partir de mesures de champs cinématiques planes. Les méthodes sont illustrées sur deux cas d'applications synthétiques permettant d'illustrer leurs apports et leur limites actuelles.

Mots clés — Méthodes Inverses, Parcimonie, Méthodes sans modèles.

1 Introduction

La déformation de polycristaux métalliques peut être décrite à différentes échelles de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique. A chacune des échelles, des théories spécifiques ont été développées pour décrire les mécanismes de déformation à partir d'un matériau initial non déformé. Parmi ces modèles, la Plasticité Cristalline permet le passage de l'échelle du cristal à une échelle mésoscopique polycristalline [1]. Dans sa forme la plus simple, la CP se base sur la notion de glissements plastiques $\{\gamma^\alpha\}_{\alpha=0\dots N_{\text{sys}}}$ et de cissions résolues $\{\tau^\alpha\}_{\alpha=0\dots N_{\text{sys}}}$ où N_{sys} correspond au nombre de système de glissement des monocristaux constituant l'agrégat polycristallin et dépend de la configuration de la maille cristalline.

Le glissement plastique γ^α sur le système de glissement α décrit le mouvement global des dislocations sur le plan de glissements plan de glissement de normal \mathbf{n}^α dans la direction \mathbf{d}^α . Il est relié aux cissions critiques résolues au travers d'un modèle d'écrouissage empirique ou physiquement fondé [3].

Deux relations de passages permettent la transition de l'échelle du cristal à l'échelle mésoscopique et définissent (1) la déformation plastique mésoscopique \mathcal{E}^p à partir des glissements plastiques et (2) les cissions résolus à partir de la contrainte mésoscopique σ . Ces relations de passages font intervenir une famille de tenseurs déviatoriques d'ordre 2 dite de Schmid-Boas de taille N_{sys} .

Les réponses globales prédites par cette famille de modèles sont satisfaisantes mais valider les réponses locales prédites est difficile de par la difficulté d'estimer les quantités d'intérêt du modèle. Enfin la prise en compte de phénomènes comme la variation de taille de grain (effet Hall-Petch), le glissement au joint de grains,... reste encore une question ouverte.

Cette article présente deux méthodes inverses pour caractériser le comportement élasto-plastique de polycristaux à partir d'observations de champs cinématiques. La première méthode s'intéressera à la quantification de la plasticité mésoscopique et la seconde méthode à la quantification de glissements plastiques et de cissions résolus. Les deux approches s'appuie sur des méthodes d'optimisation parcimonieuse pour réduire la dimensionalité de la solution. Les méthodes développées sont validées sur des données synthétiques sur des matériaux monophasique à maille cubique face-centrée.

2 Méthodes utilisés

2.1 Une brève introduction à la plasticité cristalline

Un modèle de comportement en plasticité cristalline petite déformation peut s'écrire de la manière suivante :

$$\forall \mathbf{X}, t, \forall \alpha \in [1, N_{\text{sys}}] : \begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{X}, t) = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p, \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}, t) = \mathbb{H}(\boldsymbol{\theta}(\mathbf{X}))\boldsymbol{\varepsilon}^e, \\ \boldsymbol{\varepsilon}^p(\mathbf{X}, t) = \sum_{\alpha} \mathcal{P}^{\alpha}(\mathbf{X}, t)\gamma^{\alpha}(\mathbf{X}, t), \\ \boldsymbol{\tau}^{\alpha}(\mathbf{X}, t) = \mathcal{P}^{\alpha}(\mathbf{X}, t) : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{X}, t), \\ \mathcal{P}^{\alpha}(\mathbf{X}, t) = \frac{1}{2}(\mathbf{d}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}^{\alpha} + \mathbf{n}^{\alpha} \otimes \mathbf{d}^{\alpha}), \\ \dot{\gamma}^{\alpha} = \mathcal{H}(\{\boldsymbol{\tau}^{\alpha}\}_{\alpha=0\dots N_{\text{sys}}}, \{\gamma^{\alpha}\}_{\alpha=0\dots N_{\text{sys}}}, \boldsymbol{\nu}) \end{cases} \quad (1)$$

où $\mathbb{H}(\boldsymbol{\theta}(\mathbf{X}))$ le tenseur d'élasticité cubique qui dépend de l'orientation locale $\boldsymbol{\theta}$ du cristal dans le repère de l'éprouvette, \mathcal{P}^{α} le tenseur de Schmid-Boas correspondant au système de glissement α , $\boldsymbol{\nu}$ un ensemble de variable interne à choisir et \mathcal{H} une loi de comportement élasto(-visco)-plastique décrivant l'évolution du glissement sur le système α en fonction des glissements et des contraintes résolues sur l'ensemble des systèmes de glissements. Dans nos approches, la dernière équation ne sera pas utilisée.

2.2 Considérations nécessaires pour l'identification de modèles de plasticité cristalline

La première est d'ordre phénoménologique, en effet lors d'essai in-situ on n'observe rarement l'activation simultanée de plus de 3 systèmes de glissements [2, 7]. La simulation en CP permet très rarement d'avoir des résultats consistant avec ses observations, du fait que les surfaces de charges employées soient C^0 [3].

La seconde est d'ordre physique / théorique, la base des tenseurs d'ordre 2 symétrique et déviateurique dans \mathbb{R}^3 est de dimension 5, hors les familles tensorielles de Schmid-Boas sont de dimension supérieure ou égale à 12, la décomposition d'une déformation plastique sur cette famille n'est donc pas unique. Un conséquence majeur de cette non-unicité est qu'une méthode classique d'identification (du type moindres carrés) ne permettra pas d'obtenir une solution.

2.3 Identification parcimonieuse de glissement

Les deux observations précédentes implique nécessairement deux types de régularisation d'un processus d'identification de type moindres carrés :

1. une régularisation promouvant une solution parcimonieuse,
2. une régularisation « stabilisant » le processus.

On adopte ici le formalisme proposé par Steven L. Brunton [4] dans le cadre d'identification de systèmes dynamiques à l'identification de systèmes de glissements actifs :

$$I_{\text{sp}} = \underbrace{\left\| \sum_{\alpha} \mathcal{P}^{\alpha}(\mathbf{X}, t)\gamma^{\alpha}(\mathbf{X}, t) - \boldsymbol{\varepsilon}^p \right\|^2}_{\text{moindres carrés régularisés}} + \frac{\kappa}{2} \|\gamma - \gamma_{\text{sp}}\|^2 + \underbrace{\mu \mathbf{R}(\gamma_{\text{sp}})}_{\text{Parcimonie}}, \quad (2)$$

les paramètres de régularisations (κ, μ) permettent respectivement (1) de contrôler la ressemblance entre le glissement recherché γ et γ_{sp} la solution parcimonieuse la plus proche et (2) de contrôler la cardinalité de la solution. Enfin, \mathbf{R} est une norme ℓ_p avec $p \in]0, 1]$. Cette fonctionnelle permet d'assurer les deux régularisations nécessaires et peut se résoudre de manière efficace par des approches de gradient-proximal [8].

3 Partition d'une déformation mesurée

3.1 Formulation du problème

Dans un premier temps, on s'intéresse à décomposer la déformation mesurée $\boldsymbol{\varepsilon}_m$ (que l'on considérera comme provenant d'une mesure de DIC 2D dans la suite) en une contribution élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ et une

contribution plastique ε^p :

$$I_{\text{part}}(\varepsilon^e, \varepsilon^p; \varepsilon_m) = \|\varepsilon_m - P_{2D}(\varepsilon^e + \varepsilon^p)\|_2^2,$$

avec P_{2D} un opérateur tensoriel permettant d'extraire la portion plane du tenseur auquel il s'applique. Dans le cas où la mesure serait 3D (obtenue par DVC par exemple), prendre $P_{2D} = \mathbb{I}_3$ permet de repasser à une formulation 3D complète.

Une contrainte d'admissibilité statique 2D ainsi qu'une condition de bord libre sont ajoutées pour assurer que la déformation élastique obtenue permette l'équilibre des contraintes :

$$\begin{cases} \text{div}(\mathbb{H}\varepsilon^e) = 0, \\ \mathbb{H}\varepsilon^e \cdot \vec{e}_3 = 0, \end{cases} \quad (3)$$

ce qui se traduit sous la forme du problème de minimisation suivant :

$$\min_{\varepsilon^e, \varepsilon^p} I_{\text{part}}(\varepsilon^e, \varepsilon^p; \varepsilon_m) + \boldsymbol{\eta}(\text{div}(\mathbb{H}\varepsilon^e)) + \boldsymbol{\chi}(\mathbb{H}\varepsilon^e \cdot \vec{e}_3),$$

où $(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\chi})$ sont les multiplicateurs de Lagrange associés aux conditions d'équilibre (équation 3). En notation de Mandel, cette fonctionnelle devient :

$$\|\mathbf{E}_m - \mathbf{C}_{\text{in}}^T(\mathbf{E}^e + \mathbf{E}^p)\|_2^2 + \boldsymbol{\eta}^T((w_{2D}\mathbf{B}_{2D})^T(\mathbf{C}_{\text{in}}^T\mathbb{H}\mathbf{E}^e) - f) + \boldsymbol{\chi}^T(\mathbf{C}_{\text{out}}^T\mathbb{H}\mathbf{E}^e), \quad (4)$$

l'opérateur gradient 2D élément finis \mathbf{B}_{2D} et le w_{2D} les poids d'intégration permettant de définir l'opération divergence $(w_{2D}\mathbf{B}_{2D})^T$, enfin \mathbf{C}_{in} et \mathbf{C}_{out} sont deux opérateurs permettant d'extraire respectivement la partie plane \bullet_{in} et hors plan \bullet_{out} d'un tenseur symétrique en représentation de Mandel et vérifiant :

$$\bullet = \mathbf{C}_{\text{in}} \bullet_{\text{in}} + \mathbf{C}_{\text{out}} \bullet_{\text{out}},$$

3.2 Algorithme de résolution

Ici, nous proposons un algorithme alternée de résolution où la déformation plastique et élastique sont mises à jour indépendamment.

3.2.1 Mise à jour de la déformation élastique

La mise à jour de la déformation élastique nécessite de calculer les variations de I_{part} par rapport à \mathbf{E}^e et aux multiplicateurs de Lagrange $(\boldsymbol{\eta}^T, \boldsymbol{\chi}^T)$ qui la contraignent :

$$\begin{cases} \mathbf{C}_{\text{in}}\mathbf{C}_{\text{in}}^T\mathbf{E}^e + \mathbb{H}\mathbf{C}_{\text{in}}w_{2D}\mathbf{B}_{2D}\boldsymbol{\eta} + \mathbb{H}\mathbf{C}_{\text{out}}\boldsymbol{\chi} = \underbrace{\mathbf{C}_{\text{in}}(\mathbf{E}_m - \mathbf{C}_{\text{in}}^T\mathbf{E}^p)}_{F_{\varepsilon^e}}, \\ \mathbf{B}_{2D}^T w_{2D} \mathbf{C}_{\text{in}}^T \mathbb{H} \mathbf{E}^e = \underbrace{f}_{F_{\boldsymbol{\eta}}}, \\ \mathbf{C}_{\text{out}}^T \mathbb{H} \mathbf{E}^e = \underbrace{0}_{F_{\boldsymbol{\chi}}}, \end{cases}$$

qui est un problème linéaire de la forme suivante :

$$\overbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{C}_{\text{in}}\mathbf{C}_{\text{in}}^T & \mathbb{H}\mathbf{C}_{\text{in}}w_{2D}\mathbf{B}_{2D} & \mathbb{H}\mathbf{C}_{\text{out}} \\ \mathbf{B}_{2D}^T w_{2D} \mathbf{C}_{\text{in}}^T \mathbb{H} & 0 & 0 \\ \mathbf{C}_{\text{out}}^T \mathbb{H} & 0 & 0 \end{bmatrix}}^{K_{\varepsilon^e}} \begin{Bmatrix} \mathbf{E}^e \\ \boldsymbol{\eta} \\ \boldsymbol{\chi} \end{Bmatrix} = \overbrace{\begin{Bmatrix} F_{\varepsilon^e}(\mathbf{E}^p; \mathbf{E}_m) \\ F_{\boldsymbol{\eta}} \\ F_{\boldsymbol{\chi}} \end{Bmatrix}}^F \quad (5)$$

le seul terme dépendant explicitement de la déformation plastique est $F_{\varepsilon^e}(\mathbf{E}^p; \mathbf{E}_m)$ qui doit être mis à jour à chaque itération.

3.2.2 Mise à jour de la déformation plastique

Pour la déformation plastique, seule la partie plane du tenseur, *i.e* $P_{2D}\varepsilon^p$, intervient dans la fonction objectif. Par construction, cette déformation est intrinsèquement 3D (système d'équation 1) on injecte donc la décomposition de la déformation plastique sur la famille de tenseur de Schmid-Boas $\{\mathcal{P}^\alpha\}_{\alpha \in [1, N_{\text{sys}}]}$, qui prend la forme suivante en notation de Mandel :

$$\mathbf{E}^p = [\mathcal{P}]\Gamma. \quad (6)$$

avec $[\mathcal{P}]$ une condensation des tenseurs de Schmid-Boas dans une matrice. La seule conséquence de ce changement de variable est sur le terme $F_{\varepsilon^e}(\mathbf{E}^p; \mathbf{E}_m)$ qui s'écrit maintenant :

$$F_{\varepsilon^e}(\mathbf{E}^p; \mathbf{E}_m) = F_{\varepsilon^e}(\Gamma; \mathbf{E}_m) = C_{\text{in}}(\mathbf{E}_m - C_{\text{in}}^T[\mathcal{P}]\Gamma). \quad (7)$$

Finalement, l'estimation du glissement est possible par minimisation de la fonctionnelle 2 en forçant d'avoir une grande parcimonie, $\text{card}(\gamma) \leq 5$, à partir l'écart entre la mesure ε_m et la partie plane du tenseur des déformations élastique $P_{2D}\varepsilon^e$ et ce en chaque point de mesure de déformation, qui correspondent ici au point d'intégration du maillage.

3.3 Exemple de résultats

La figure 1 présente un résultat d'identification sur des données synthétiques 3D (générées à partir d'un EBSD et de mesure de déplacement de DIC expérimentaux sur de l'aluminium pur) pour un pas de temps au début de l'érouissage.

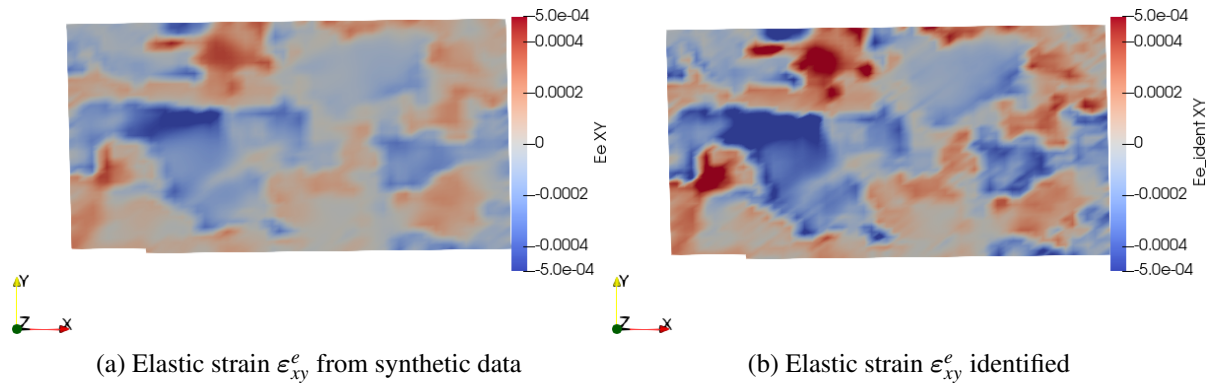


FIGURE 1 – Comparaison qualitative de la déformation élastique estimée et de la déformation élastique de référence

On voit que la méthode proposée permet bien de reconstruire des champs cohérents par rapport aux champs réels.

4 Estimation d'une relation comportement de type plasticité cristalline par une approche Data-Driven

On s'intéresse maintenant à la formulation d'un problème dit Data-Driven [5, 6] pour l'estimation de relation de comportement dans l'espace des phases $(\gamma, \tau, \varepsilon^e)$, ou (γ, τ, σ) qui sont les quantités nécessaires pour décrire complètement la réponse élasto(-visco)-plastique d'un cristal. Les approches d'identification Data-Driven (DDI) repose sur deux hypothèses :

1. pour des observations cinématiques (ou une histoire cinématique) similaires les contraintes doivent être similaires,
2. que l'on a suffisamment de données pour calculer cette similarité.

La similarité est calculé en introduisant des états moyennant les états mécaniques observés , que l'on qualifie par la suite de « clusters » et que l'on note de la façon suivante : $(\gamma^*, \tau^*, \varepsilon^{e*})$.

4.1 Formulation du problème d'identification Data-Driven

La métrique choisit pour quantifier cette similarité est la suivante :

$$\|\mathcal{A}, \mathcal{B}\|_{\mathbb{G}_0}^2 = \mathcal{A}^T \mathbb{G}_0 \mathcal{A} + \mathcal{B}^T \mathbb{G}_0^{-1} \mathcal{B}. \quad (8)$$

avec $(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ des vecteurs et la matrice diagonal \mathbb{G}_0 permettant la normalisation des quantités. De manière identique, on peut définir une norme sur des tenseurs.

On formule le problème d'identification de la manière suivante :

$$I_{\text{DDI}} = \frac{1}{2} \sum_t \sum_e \|\mathcal{K}, \mathcal{L}\|_{\mathbb{G}_0}^2 + \|\mathcal{R}_\Sigma\|_{\mathbb{H}_0^{-1}}^2, \quad (9)$$

avec :

$$\begin{cases} \mathcal{K} &= \Gamma - \mathbf{S}\Gamma^*, \\ \mathcal{L} &= [\mathcal{P}]^T \Sigma - \mathbf{S}\mathbf{T}^*, \\ \mathcal{R}_\Sigma &= \Sigma - \mathbb{H}\mathbf{S}\mathbf{E}^{e*}, \end{cases} \quad (10)$$

où \mathbf{S} est un opérateur permettant de projeter les clusters de l'espace matériau à l'espace physique. La fonctionnelle 9 est minimiser sous contrainte d'équilibre mécanique (pour simplifier l'écriture, les subscripts 2D et les conditions de bords libre ne sont pas expliciter dans la suite). ce qui donne lieu à :

$$\min_{\Sigma, \Gamma^*, \mathbf{T}^*} \underbrace{I_{\text{DDI}} + \lambda^T (\mathbf{w}\mathbf{B}^T \Sigma - \mathbf{f})}_{\Phi}, \quad (11)$$

4.2 Résolution

On emploie ici aussi une stratégie de résolution alternée, une première étape consiste à estimer les glissements plastiques à partir d'une estimation de la déformation plastique, puis dans un second temps le champ de contraintes et les cissions résolues associé permettant de mettre à jour le clustering dans l'espace des phases. L'estimation des glissements emploie la même méthode que précédemment, la mise à jour des contraintes et des états matériaux ce fait en calculant les variation de Φ par rapport à la quantité d'intérêt :

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial \Sigma} \rightarrow [\mathcal{P}]\mathbb{G}_0^{-1} \mathcal{L} + \mathbb{H}^{-1} \mathcal{R}_\Sigma + \mathbf{w}\mathbf{B}\lambda = 0 \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \rightarrow (\mathbf{w}\mathbf{B})^T \Sigma = \mathbf{f} \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{E}^{e*}} \rightarrow -\mathbf{S}^T \mathbb{H}\mathbb{H}_0^{-1} \mathcal{R}_\Sigma = 0 \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \Gamma^*} \rightarrow -\mathbf{S}^T \mathbb{G}_0 \mathcal{K} = 0 \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{T}^*} \rightarrow -\mathbf{S}^T \mathbb{G}_0^{-1} \mathcal{L} = 0 \end{cases} \quad (12)$$

Ce qui permet d'écrire le système suivant pour le calcul des contraintes et du multiplicateur de Lagrange associé :

$$\begin{cases} \overbrace{([\mathcal{P}]\mathbb{G}_0^{-1}[\mathcal{P}]^T + \mathbb{H}_0^{-1}) \Sigma + \mathbf{w}\mathbf{B}\lambda}^{\mathbf{K}_\sigma} = \overbrace{[\mathcal{P}]\mathbb{G}_0^{-1} \mathbf{S}\mathbf{T}^* + \mathbb{H}_0^{-1} \mathbb{H}\mathbf{S}\{\mathbf{E}^{e*}\}}^{\mathbf{F}_\sigma}, \\ (\mathbf{w}\mathbf{B})^T \Sigma = \mathbf{f}, \end{cases} \quad (13)$$

qui prend la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_\sigma & (\mathbf{w}\mathbf{B}) \\ (\mathbf{w}\mathbf{B})^T & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Sigma \\ \lambda \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{F}_\sigma \\ \mathbf{f} \end{Bmatrix} \quad (14)$$

4.3 Exemple de résultats

La figure 2 présente un résultat d'identification de contrainte sur des données synthétiques 3D sur une géométrie synthétique. La figure 3 présente, pour la même procédure d'identification, une représentation des données dans l'espace des phases choisi précédemment.

Encore une fois, la méthode proposée permet bien de reconstruire des champs cohérents par rapport aux champs réels et d'échantillonner une réponse matérielle dans l'espace des phases.

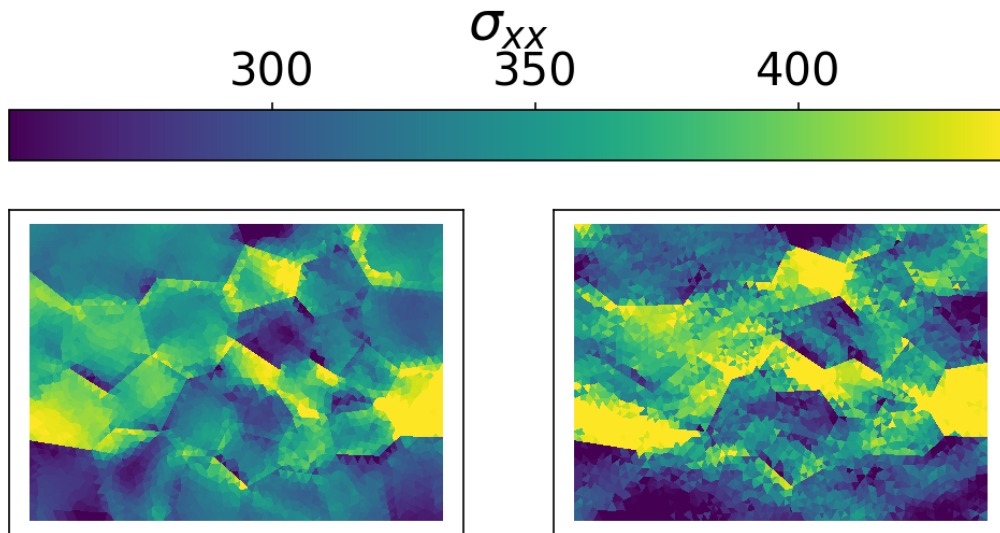
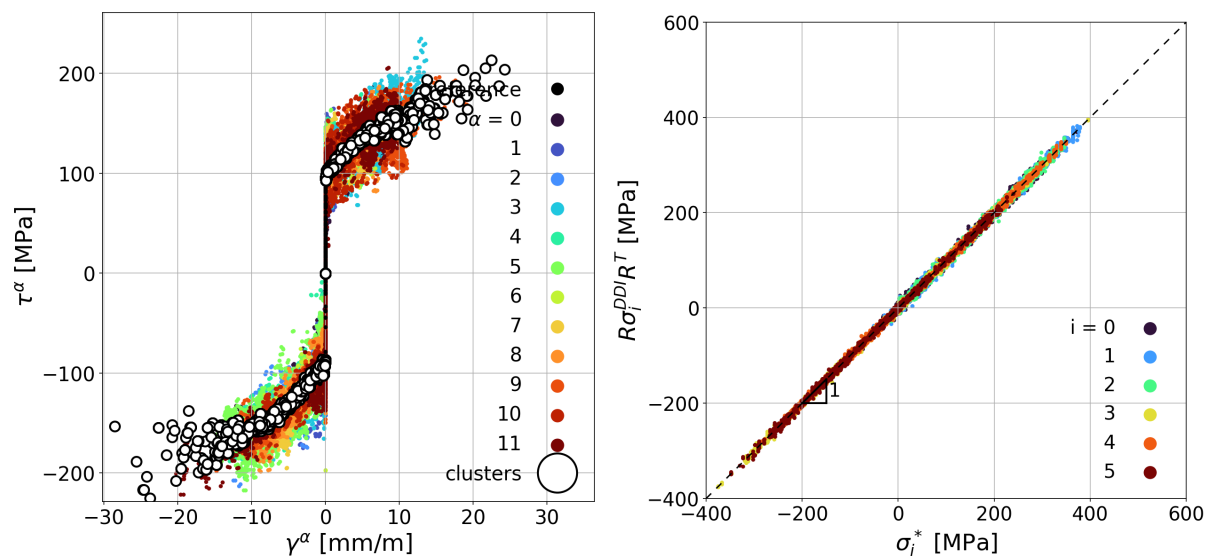


FIGURE 2 – Comparaison qualitative de la contrainte σ_{xx} obtenu par rapport à la référence



(a) Cission résolues en fonction des glissements plas- (b) Contrainte matérielle projeté $\mathbb{H}SE^{e*}$ en fonction de
tiques la contrainte σ (dans le repère du cristal)

FIGURE 3 – Résultats dans l'espace des phases

5 Conclusions

Cette contribution présente deux méthodes inverses permettant l'estimation de grandeurs d'intérêt pour les modèles de plasticité cristalline. Les deux s'appuient sur un outils commun de projection parcimonieuse pour quantifier des glissements cristallins à partir d'estimation de déformations plastiques. On présentera oralement plus en détails la validation des méthodes sur différents cas synthétiques et discutera également des limites actuelle et des améliorations possibles de ces méthodes.

Références

- [1] Asaro, R.J., *Micromechanics of Crystals and Polycrystals*, Advances in Applied Mechanics, 1983.
- [2] Berger, A., Witz, J.-F., El Bartali, A., Sadat, T., Limodin, N., Dubar, M., Najjar, D., *Experimental investigation of early strain heterogeneities and localizations in polycrystalline α -Fe during monotonic loading*, International Journal of Plasticity, 2022.
- [3] Borja, R.I., *Plasticity : Modeling Computation*, 2013.

- [4] Brunton, S.L., Proctor, J.L., Kutz, J.N., *Discovering governing equations from data by sparse identification of nonlinear dynamical systems*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 2016.
- [5] Hachem, N., Leygue, A., Stainier, L., *Mathematical and numerical assessment of Data-Driven Identification method applied to nonlinear elasticity*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2025.
- [6] Leygue, A., Coret, M., Réthoré, J., Stainier, L., Verron, E., *Data-based derivation of material response*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2018.
- [7] Vermeij, T., Peerlings, R.H.J., Geers, M.G.D., Hoefnagels, J.P.M., *Automated identification of slip system activity fields from digital image correlation data*. Acta Materialia, 2022.
- [8] Zheng, P., Askham, T., Brunton, S.L., Kutz, J.N., Aravkin, A.Y., *A Unified Framework for Sparse Relaxed Regularized Regression : SR3*. IEEE Access 7, 2019.