



HAL
open science

Du polycristal au multicristal: vers un mésoscope numérique

Stéphane Héraud, Lucien Allais, Halim Haddadi, Bernard Marini, Cristian Teodosiu, André Zaoui

► **To cite this version:**

Stéphane Héraud, Lucien Allais, Halim Haddadi, Bernard Marini, Cristian Teodosiu, et al.. Du polycristal au multicristal: vers un mésoscope numérique. *Journal de Physique IV Proceedings*, 1998, 8, pp.27-32. 10.1051/jp4:1998403. hal-00111609

HAL Id: hal-00111609

<https://hal.science/hal-00111609v1>

Submitted on 24 Mar 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial 4.0 International License

Du polycristal au multicristal : vers un mésoscope numérique

S. Héraud, L. Allais, H. Haddadi*, B. Marini, C. Teodosiu* et A. Zaoui**

DECMSRMA, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

** LPMTM-CNRS, Université Paris Nord, 93430 Villetaneuse, France*

*** LMS, École Polytechnique, 91120 Palaiseau, France*

Résumé : La compréhension des mécanismes d'endommagement, notamment intergranulaires des polycristaux passe par la connaissance précise des champs mécaniques (contraintes, déformations) à l'échelle mésoscopique. Le but de cette étude est de les déterminer par simulation numérique. Pour cela nous considérerons un motif multicristallin inclus dans un milieu homogène équivalent. Ce milieu obéit au comportement expérimental du matériau (ici du 316 L(N) à chaud) à l'échelle macroscopique; le comportement cristallin microscopique est lui aussi connu. Une simulation par un code de calcul par éléments finis prenant en compte l'aspect cristallin du motif et celui continu de la matrice nous donnera les champs mécaniques dans le motif. Nous définirons le cadre théorique de ce "mésoscope numérique", en insistant sur le concept de relocalisation et sur sa position vis à vis des modèles de passage micro-macro. Puis, nous aborderons les difficultés du choix du motif multicristallin et de la cohérence entre la loi de comportement du milieu homogène équivalent et celle des cristaux. Nous donnerons ensuite les résultats de l'identification des paramètres de la loi macroscopique. Enfin, le traitement numérique par éléments finis du problème sera abordé, et nous discuterons des premiers résultats. Nous concluons sur les évolutions et les possibilités de ce nouvel outil, notamment pour la description du comportement des joints de grains.

1. INTRODUCTION

L'industrie nucléaire est souvent confrontée à des phénomènes de rupture et d'endommagement intergranulaire: rupture à chaud, rupture fragile pour les aciers bainitiques, fragilisation des aciers par l'hydrogène... Une étude bibliographique, corroborée par des observations sous microscope électronique à balayage [1], a pu montrer que l'une des échelles pertinentes d'étude de ces mécanismes est de l'ordre d'une dizaine de micromètres. Afin de mieux comprendre ces mécanismes, il convient donc de connaître avec précision les champs mécaniques (contraintes, déformations) à cette échelle "mésoscopique". Le but de cette étude est de les déterminer par simulation numérique.

La prise en compte de l'aspect cristallin des matériaux métalliques a fait l'objet de nombreuses études. Il est utilisé notamment dans des modèles de passage micro-macro, où l'on considère le comportement moyen des familles de grains de même orientation dans le but de prédire le comportement macroscopique du polycristal. Parmi eux, on peut citer le modèle autocohérent "classique". Celui-ci localise les contraintes en moyenne dans une famille de grains donnés en la considérant comme un ellipsoïde inclus dans une matrice dont le comportement est celui du milieu homogène équivalent recherché.

D'autre part, certains codes de calcul par éléments finis intègrent cet aspect cristallin dans leurs algorithmes. Dans un premier temps, ces simulations numériques ont été élaborées pour suivre l'apparition de bandes de cisaillement dans des alliages d'aluminium. Elles ont progressivement intégré la microstructure, la forme des grains pour Becker et Panchanadeeswaran [2], puis les densités de dislocations pour Teodosiu et al. [3] et permettent ainsi de suivre avec précision les champs mécaniques dans des multicristaux (une dizaine de grains). Cependant, la validation expérimentale de tels calculs ne s'est faite jusqu'à présent que sur des éprouvettes possédant des grains de taille centimétrique.

2. CADRE THEORIQUE

2.1 Principe de relocalisation

L'idée développée dans cet article est de tirer parti d'une approche intermédiaire entre ces deux points de vue. Pour autant, dans notre étude, il ne s'agit pas de prévoir le comportement global du matériau mais de déterminer les champs mécaniques locaux à partir d'une connaissance expérimentale du

comportement global. Il est en principe possible de les connaître grâce à l'opération de localisation évoquée ci-dessus. Cependant cette opération traite seulement en moyenne les familles de grains de même orientation et ne prend pas en compte les effets de voisinage. Il est préférable, connaissant non seulement le comportement des cristaux constitutifs, mais aussi le comportement macroscopique du polycristal, de "relocaliser" les champs locaux dans des assemblages typiques de grains, par calcul (numérique) direct.

2.2 Principe du mésoscope numérique

Cette notion de relocalisation peut se concrétiser sous la forme d'un "mésoscope numérique" (Figure 1). Le comportement macroscopique est considéré comme une donnée acquise expérimentalement, et le but est de déterminer grâce à une procédure de relocalisation l'état mécanique dans de petits ensembles de grains. Pratiquement cet outil se présente sous la forme d'un motif multicristallin, typiquement une dizaine de grains, inclus dans un milieu continu infini ayant les propriétés macroscopiques réelles du matériau à étudier.

La matrice est maillée avec des éléments finis classiques. Le motif multicristallin utilise, lui, des éléments "cristallins". Ceux-ci prennent en compte l'orientation cristalline des grains et leurs différents systèmes de glissement.

Il sera alors possible de connaître précisément les concentrations de contraintes mais aussi les hétérogénéités de déformation à l'intérieur de l'ensemble de grains considéré (le "motif"). Selon l'organisation et l'orientation des grains formant le motif, il sera notamment possible de déterminer quelles sont les configurations les plus critiques vis-à-vis de l'apparition de l'endommagement.

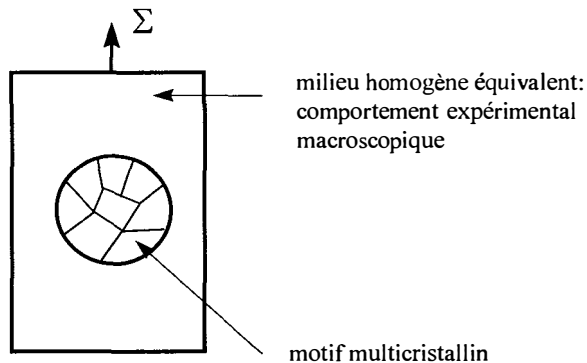


Figure 1 : Principe du mésoscope numérique

2.3 Choix du motif et des lois de comportement

Le domaine de comportement visé est celui de la viscoplasticité à chaud. Pour des raisons numériques, le motif choisi ne pourra pas dépasser une dizaine de grains. Afin d'assurer le maximum de cohérence entre le comportement de la matrice homogène et celui du motif multicristallin, nous avons adopté des lois de comportement de forme similaires. La loi d'écoulement est issue des modèles macroscopiques de type Anand [4]. L'équation qui donne la variation de l'écrouissage est, elle, issue des travaux de Kocks [5] sur les lois cristallines.

2.3.1 Lois macroscopiques

La loi d'écoulement n'est pas une loi puissance classique mais une loi en sinus hyperbolique, cette fonction se rapprochant plus de la réalité pour des hautes températures. $\dot{\bar{E}}^p$ est le taux de déformation plastique équivalent au sens de Von Mises; $\bar{\Sigma}$, la contrainte macroscopique équivalente au sens de Von Mises; S, la résistance à la déformation plastique; Q, l'énergie d'activation apparente et T la température absolue.

$$\dot{\bar{E}}^p = A \left[\sinh \left(B \frac{\bar{\Sigma}}{S} \right) \right]^{1/m} \exp \left(\frac{-Q}{RT} \right)$$

La variable interne S n'a pas de sens physique précis. Cependant, elle dépend de l'état d'écroutissage du matériau et peut être reliée à la taille des sous-grains. Sa variation prend la forme suivante :

$$\dot{S} = h_o \left| \frac{S_{sat} - S}{S_{sat} - S_0} \right|^a \operatorname{sgn}(S_{sat} - S_0) \dot{\bar{E}}^p$$

avec

$$S_{sat} = \bar{S} \left(\frac{Z}{A} \right)^n, \quad Z = \dot{\bar{E}}^p \exp \left(\frac{Q}{RT} \right) \text{ et la condition initiale } S(0) = S_0$$

Au cours de la sollicitation, ce paramètre S tend vers une valeur d'équilibre, S_{sat} qui dépend de la vitesse de déformation plastique équivalente et de la température. Ces deux variables peuvent être couplées dans toutes les équations du modèle à travers le paramètre Z de Zener Holomon. Les coefficients du matériau sont: $A, B, m, Q, h_o, S_0, a, \bar{S}, n$ et R est la constante des gaz parfaits.

2.3.2 Lois cristallines

On adopte pour elles la même forme que pour les lois macroscopiques, mais les variables d'état ne sont plus les mêmes et les coefficients non plus. L'équation d'écoulement a donc pour expression:

$$\dot{\gamma}^{(s)} = A \left[\sinh \left(B \frac{\tau^{(s)}}{\tau_c^{(s)}} \right) \right]^{1/m} \exp \left(\frac{-Q}{RT} \right) \operatorname{sgn}(\tau^{(s)})$$

avec $\dot{\gamma}^{(s)}$ vitesse de glissement sur le système de glissement s; $\tau^{(s)}$: cission résolue sur le système s; $\tau_c^{(s)}$: cission de référence sur le système s

L'interaction d'écroutissage entre les différents systèmes est régie par la loi suivante.

$$\dot{\tau}_c^{(s)} = \sum_u a^{(su)} h(Z^{(u)}, \tau_c^{(u)}) |\dot{\gamma}^{(u)}|$$

avec

$$h(Z^{(u)}, \tau_c^{(u)}) = h_o(Z^{(u)}) \frac{\tau_{sat}^{(u)}(Z^{(u)}) - \tau_c^{(u)}}{\tau_{sat}^{(u)}(Z^{(u)}) - \tau_0^{(u)}} \operatorname{sgn}(\tau_{sat}^{(u)}(Z^{(u)}) - \tau_0^{(u)})$$

$$\text{où } \tau_{sat}^{(u)}(Z^{(u)}) = \bar{\tau} \left(\frac{Z^{(u)}}{A} \right)^n \text{ et } Z^{(u)} = \dot{\gamma}^{(u)} \exp \left(\frac{Q}{RT} \right)$$

3. MISE EN ŒUVRE NUMERIQUE

3.1 Intégration de la loi de comportement cristalline

Pour créer l'outil numérique visé, nous nous sommes appuyés sur le code de calcul EPVIM 3D du L.P.M.T.M.[6] et nous en avons développé une extension cristalline. Dans la suite nous évoquons l'intégration des lois de comportement cristallines et plus particulièrement leur aspect anisotherme. Pour cela, nous utilisons un schéma de type "forward gradient" pour les incréments de glissement $\Delta\gamma^{(s)}$ sur chaque système de glissement cristallin (s). Les autres grandeurs, tels les incréments de cission de référence sur (s), $\Delta\tau_c^{(s)}$ et les incréments de cission résolue $\Delta\tau^{(s)}$, sont linéarisées (on considère que leurs dérivées par rapport au temps sont constantes sur le pas de temps). L'équation de base du schéma "forward gradient" est:

$$\Delta\gamma^{(s)} = \left[(1 - \beta)\dot{\gamma}^{(s)}(t) + \beta\dot{\gamma}^{(s)}(t + \Delta t) \right] \Delta t$$

où β a une valeur fixée au début du calcul.

On détermine $\dot{\gamma}^{(s)}(t + \Delta t)$ grâce à un développement de Taylor au premier ordre.

4. IDENTIFICATION DES COEFFICIENTS DE LA LOI MACROSCOPIQUE

4.1 Processus expérimental

Pour les raisons précédemment évoquées, nous avons dû développer nos propres modèles de comportement; il reste maintenant à les identifier. Dans cette partie nous traiterons uniquement du problème macroscopique. La base expérimentale est constituée d'essais de traction sur un acier inoxydable de type 316 L(N); la composition de l'alliage est donnée dans le Tableau 1 (en % en poids)

Tableau 1

C	S	Mn	P	S	Cr	Ni	Mo	Cu	Co	N	B
0,026	0,31	1,74	0,025	0,001	17,27	12,13	2,54	0,29	0,09	0,069	0,004

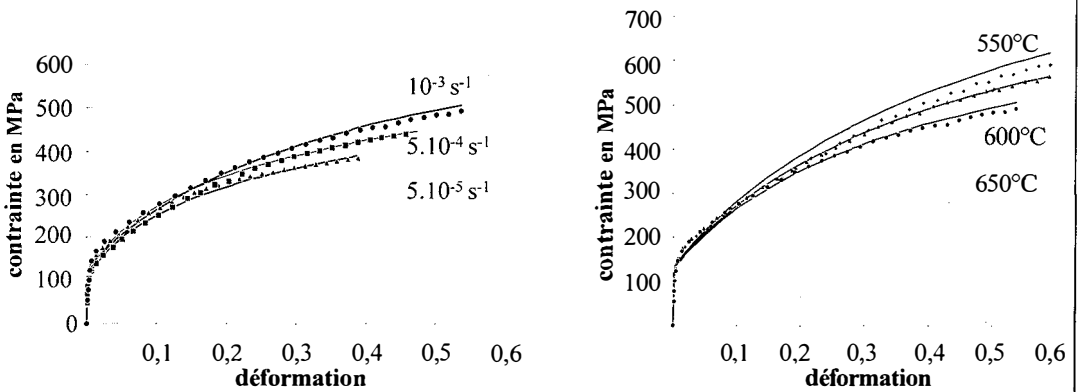
Les modèles ne sont pas explicites. Nous avons utilisé le logiciel d'identification SIDOLO [7]. Afin d'obtenir un jeu de coefficients optimal, il convient d'utiliser un jeu initial le plus proche possible de la solution. Dans la suite, nous évoquerons la recherche de ce premier jeu, puis les résultats de l'identification.

4.2 Choix d'un premier jeu de coefficients

Nous nous sommes servis du paramètre de Zener-Holomon Z . Cette variable présente l'avantage de coupler la vitesse de déformation plastique et la température. En outre, le paramètre A est fortement lié à Z . Nous l'avons choisi de telle sorte qu'il centre l'intervalle de variation de Z/A autour de l'unité. En récrivant toutes les équations du modèle en fonction de Z/A , nous avons pu procéder à une identification des coefficients par étape. Ainsi la régression non linéaire de la courbe (Z/A ; R_m) nous a donné les coefficients $\bar{\sigma}$ et n , la courbe (Z/A , $R_p0.2$) les valeurs de s_0 et m . Les autres coefficients (h_0 et a) ont été identifiés sur une courbe de traction située au centre du domaine couvert.

4.3 Optimisation et résultats

Après optimisation, nous avons obtenu le jeu de coefficients indiqué au Tableau 2. La Figure 2 permet de visualiser l'adéquation entre les courbes simulées avec ce jeu et les essais. Le modèle adopté traduit donc de manière satisfaisante l'influence de la vitesse de déformation, (figure 2 a), et de la température, (figure 2 b), sur le comportement du matériau étudié.



a) influence de la vitesse de déformation pour une température de 650°C

b) influence de la température pour une vitesse de déformation de $10^{-3} s^{-1}$

Figure 2 : Comparaison entre les simulations (traits continus) et les essais de traction (points)

Tableau 2 : Coefficients optimisés

A	.83390E+23 s^{-1}	h_0	4640 MPa s
Q/R	34245 K	a.	2.81
\bar{s}	5570 MPa	B	1
n	0.06543	m	0.00842
s_0	175 MPa		

5. PREMIERES SIMULATIONS

Afin de montrer la faisabilité de notre outil numérique nous avons créé un maillage avec trois grains cristallins inclus dans une matrice continue. Les lois de comportement utilisées sont explicitées dans la thèse de Brown [4] pour la loi macroscopique et dans [8] pour la loi cristalline, cependant elles restent assez proches de celles évoquées précédemment. La loi d'écoulement est une loi puissance classique,

tandis que la variation de la variable interne est de la forme : $\dot{S} = h_0 \left| 1 - \frac{S}{S_{sat}} \right|^a \operatorname{sgn} \left(1 - \frac{S}{S_{sat}} \right) \dot{E}^p$. Le

matériau utilisé est de l'Al-1100 à température ambiante. Pour le grain supérieur droit (figure 3) la direction de sollicitation est $[100]$, pour le grain supérieur gauche $[1\bar{1}1]$ et pour le grain inférieur $[1\bar{2}6]$.

Les conditions aux limites sont une vitesse de déformation imposée de $10^{-3} s^{-1}$ suivant y pour la face supérieure et un déplacement suivant y nul pour la face inférieure.

Nous avons alors obtenu les résultats donnés sur la figure 3. Nous pouvons observer que les grains répondent de manière différente à la sollicitation. En outre il existe des hétérogénéités de contrainte et de déformation à l'intérieur même des grains.

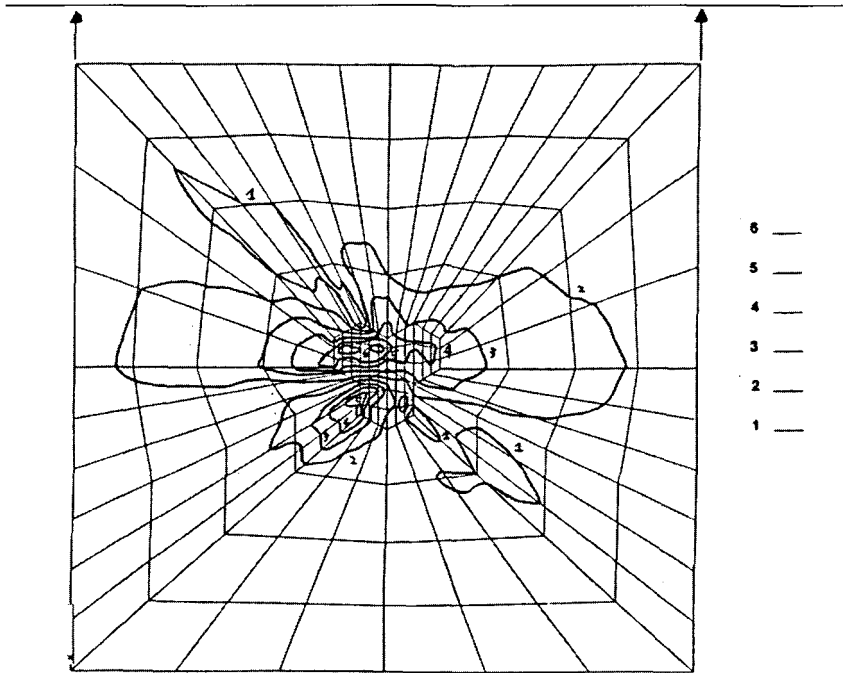


Figure 3 : Isovaleurs des contraintes de Von Mises en MPa (continuité des contraintes sur tout le maillage), 5 % de déformation macroscopique, 180 MPa de contrainte macroscopique

6. COMMENTAIRES ET CONCLUSION

Par l'exemple traité ci-dessus, nous avons montré la validité de notre outil numérique. Il nous reste à finir de l'adapter au cas de l'acier de type 316L(N), et notamment de déterminer les coefficients cristallins des lois de comportement adoptées. Dans un second temps nous essaierons de nous rapprocher de microstructures observées, pour pouvoir valider notre outil vis-à-vis d'expériences de traction in-situ et de suivi des déformations par microgrilles.

[1] Document interne C.E.A. C.R. SRMA 95, 1520

[2] R. Becker and S. Panchanadeeswaran, "*Effects of grain interactions on deformation and local texture in polycrystals*", 1995, Acta metall. Mater. Vol 43, No 7, pp. 2701-2719

[3] C. Teodosiu, J.L. Raphanel, L. Tabourot "*Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals*", 1993, Mecamat'91, Teodosiu, Raphanel & Sidoroff (eds), Balkema, Rotterdam

[4] S. Brown, L. Anand "*An internal variable constitutive model for the hot working of metals*" 1987, Thèse du Massachusetts Institute of Technology (U.S.A)

[5] U.F. Kocks, "*Laws for work-hardening and low temperature creep*", 1976, J. Eng. Mater. Technol. Vol 98, pp. 76-85

[6] H. Haddadi, "*Matériaux composites à matrice métallique: modélisation du comportement thermoelastoviscoplastique et résolution de problèmes aux limites 3D*", 1996, thèse de l'Université de Paris 13

[7] Notice d'utilisation de SIDOLO, avril 93, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

[8] L. Anand, cours de l'avanced school "*Large Plastic deformation of crystallin aggregates*", UDINE, 1996