



HAL
open science

Simulations 3D d'agrégats polycristallins reconstruits par approche type CAO

Mikaël Gueguen, Loïc Signor, Jean Dumoncel, Patrick Villechaise

► **To cite this version:**

Mikaël Gueguen, Loïc Signor, Jean Dumoncel, Patrick Villechaise. Simulations 3D d'agrégats polycristallins reconstruits par approche type CAO. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. pp.Clé USB. hal-00592810

HAL Id: hal-00592810

<https://hal.science/hal-00592810v1>

Submitted on 3 May 2011

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.

Simulations 3D d'agrégats polycristallins reconstruits par approche type CAO

M. Guéguen¹, L. . Signor¹, J. Dumoncel¹, P. Villechaise¹

¹ Institut Pprime, UPR 3346 CNRS ENSMA Université de Poitiers, {mikael.gueguen}@ensma.fr

Résumé —

L'article présente des simulations de plasticité cristalline sur des agrégats 3D polycristallins dont les données morphologiques et cristallographiques sont issues de cartographies EBSD. Les grains de la cartographie sont approximés par des disques sur la surface, nous servant par la suite à la création des grains dans le volume. La construction des grains est enfin finalisée à partir de surface NURBS nous permettant de s'affranchir d'un maillage directement basé une discrétisation en voxels du volume. Une application aux alliages de titane est présentée . Une loi de comportement élasto-visco-plastique cristalline est ensuite utilisée pour simuler la réponse mécanique, sous chargement cyclique, des agrégats générés.

Mots clés — Polycrystal ; Plasticité Cristalline ; Reconstruction de microstructure 3D ; NURBS

1 Introduction

L'étude du comportement des matériaux en fatigue reste primordiale pour le dimensionnement de nombreuses pièces industrielles. Au sein des métaux et alliages métalliques polycristallins tels que les alliages de titane pour turboréacteurs, l'activité plastique locale tient un rôle prédominant dans les premiers stades d'endommagement précurseur de l'amorçage de fissures, notamment par l'apparition et le développement de bandes de glissements persistantes. Ce phénomène est directement lié aux hétérogénéités microstructurales de ces matériaux, notamment dans le cas de la fatigue à grand nombre de cycles, où la réponse macroscopique du matériau considéré reste essentiellement élastique. L'endommagement dans ce cas de figure est extrêmement localisé, et devient donc très difficile à prévoir.

Dans ce contexte, la simulation numérique directe du comportement des agrégats polycristallins offre la possibilité d'identifier et de comprendre les micromécanismes à l'oeuvre à l'échelle des grains. Afin de les décrire, une représentation précise de la morphologie de la microstructure s'avère nécessaire. Plusieurs possibilités existent pour représenter un matériau polycristallin. Généralement, la reconstruction des grains dans le volume se fait par un algorithme de Voronoï et le maillage du volume se fait par voxelisation de l'espace ou par maillage libre [1], [2], [3]. Une seconde possibilité est d'effectuer une reconstruction de l'agrégat sur la base directe d'observations expérimentales, notamment par diffraction des électrons retro-diffusés (EBSD) donnant accès à l'orientation cristalline locale et ainsi à la morphologie des grains [4]. La reconstruction d'un agrégat tridimensionnel nécessite une série d'analyses successives dans la profondeur par polissages successifs (ou coupes sériées) [5], dont l'obtention et la mise en oeuvre s'avèrent très lourdes. Une autre approche consiste à utiliser directement les informations morphologiques contenues dans les cartographies EBSD de surface, et de reconstruire les grains dans le volume en les approximant par des ellipsoïdes [6].

La méthode de reconstruction d'agrégat polycristallin présentée dans l'article (Section 2) se base sur l'approximation des grains par des sphères. Celles-ci servent de support pour définir et reconstruire les entités géométriques des grains (points triples, courbes de contours, surfaces de frontière) via des outils de CAO, permettant d'obtenir une morphologie de grains plus réaliste que celle issue d'une tessellation de Voronoï. En définissant les sphères des grains de surface à partir d'une cartographie EBSD, l'agrégat tridimensionnel reconstruit restitue relativement fidèlement la morphologie des grains de la face observée qui servira de référence pour les simulations numériques réalisées ultérieurement (Section 3). Celles-ci concernent la réponse mécanique de l'agrégat sous chargement cyclique. La réponse locale des grains

est décrite par une loi de comportement élasto-visco-plastique monocristalline (ou dite de type plasticité cristalline). Les résultats obtenus sur l'agrégat généré par la méthode présentée sont comparés à ceux obtenus avec des agrégats générés par d'autres méthodes plus classiques (Section 4).

2 Génération de la microstructure

2.1 Reconstitution de cartographies EBSD

La reconstruction proposée s'appuie sur la morphologie déduite des cartographies EBSD expérimentales en approximant dans un premier temps les grains par des ellipses ou des disques sur la surface.

Pour les disques, les positions des centres correspondent aux barycentres des grains, et les rayons sont évalués à partir des aires des grains. Pour les ellipses, les paramètres (petit axe, grand axe, orientation) sont évalués par une méthode des moindres carrés permettant de minimiser la distance entre l'ellipse et l'ensemble des points des grains. Une fois le positionnement des disques (resp. ellipses) effectués, une extraction des zones inter-disques (resp. inter-ellipses) est faite par segmentation de l'image visant à réaffecter les zones non attribuées et à compléter complètement la cartographie. L'affectation s'effectue par la recherche du disque (resp. de l'ellipse) le (resp. la) plus proche de chaque pixel.

Cette méthode est appliquée pour reconstituer la première couche de grains (figure 1). On peut noter que la reconstruction par ellipses permet de conserver la forme allongée de certains grains. La figure 2 montre la distribution de l'aire des grains de la cartographie initiale et des deux reconstructions. Bien que la distribution des aires soit globalement respectée dans les deux cas, les deux méthodes semblent présenter des difficultés à restituer les plus petits grains. Pour les gros grains, la reconstruction par ellipse semble s'avérer la plus fidèle.

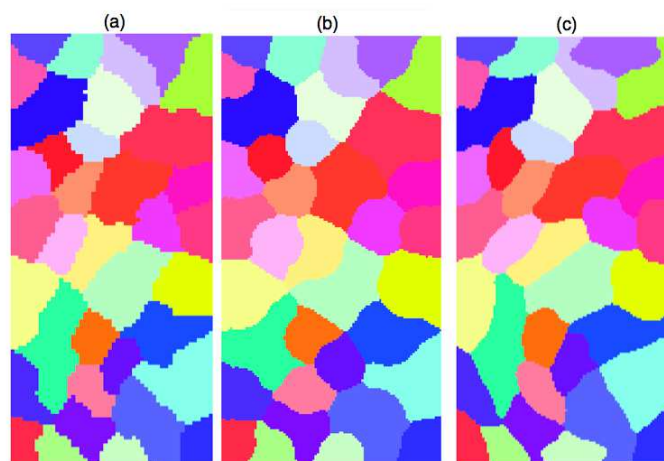


FIGURE 1 – Reconstitution des cartographies EBSD. (a) cartographie expérimentale initiale (EBSD); (b) reconstruction par disques; (c) reconstruction par ellipses

2.2 Reconstitution de l'agrégat dans le volume

Nous nous plaçons dans le cas de la génération de grains equiaxes où les grains en surfaces sont approximés par des disques. A partir de cette identification des grains pour la couche de surface, des sphères sont créées pour cette première couche. Un ensemble de sphères est alors généré en se basant sur les statistiques géométriques de la cartographie EBSD initiale. Ces sphères sont ensuite placées dans différentes partitions du volume de façon à optimiser le remplissage de la boîte considérée, en autorisant un certain recouvrement entre les sphères. Les sphères sont placées aléatoirement dans la boîte en les positionnant par rayon décroissant (figure 3).

Une fois le placement des sphères effectuées, il est possible de déterminer les frontières entre les grains en résolvant l'algorithme défini dans la table 2.2 et basé sur les équations (1-3).

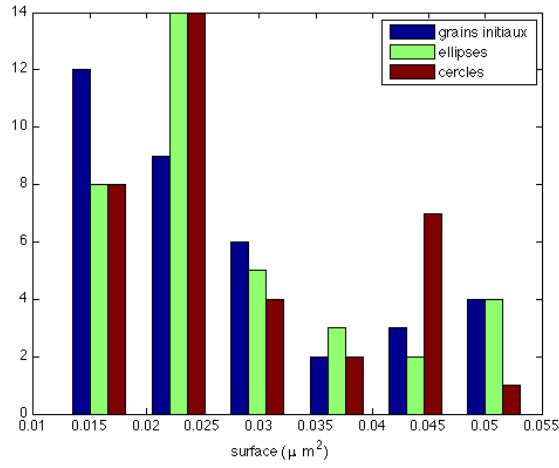


FIGURE 2 – Comparaison de la distribution de l’aire des grains observée expérimentalement avec celle des reconstructions par disques et ellipses.

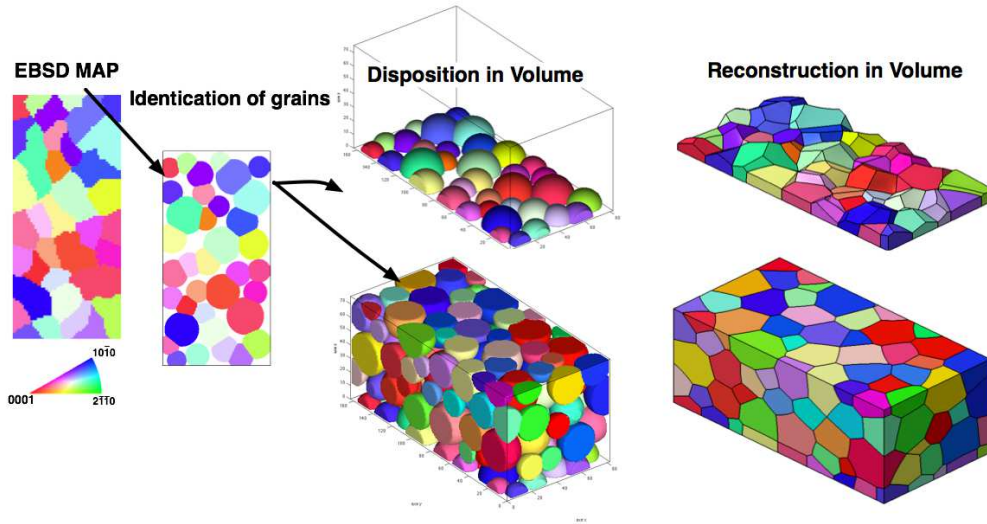


FIGURE 3 – Méthodologie de reconstruction de l’agrégat

La frontière entre un grain i et un grain j est une isosurface définie par l’équation 1. Un grain est alors définis par le système d’inéquations (équation 2), prenant en compte les n grains adjacents. La recherche des frontières prend aussi en compte la taille de la boîte de reconstruction (équation 3).

$$f(x^k) = 0 \quad f(x^k) = \text{abs}((\sqrt{(x^k - x_i^k)^2} - r_i) - (\sqrt{(x^k - x_j^k)^2} - r_j)) \quad (1)$$

$$c(x^k) \leq 0 \quad c(x^k) = (\sqrt{(x^k - x_{1 \rightarrow j-1}^k)^2} - r_{1 \rightarrow j-1}) - (\sqrt{(x^k - x_{j+1 \rightarrow n}^k)^2} - r_{j+1 \rightarrow n}) \quad (2)$$

$$\rightarrow \quad x_{min}^k \leq x^k \leq x_{max}^k \quad (3)$$

Cet algorithme de détermination des frontières permet affecter chaque point du domaine à un grain. Une recherche approchée des points triples et des contours des surfaces frontières des grains s’effectue après discrétisation (voxelisation) de la boîte.

→ pour un grain i :
 → pour tous les grains j adjacents :
 → résolution du système d'inéquation $\min_x f(x), c(x) \leq 0$.
 → détermination des points d'intersections entre les frontières.

TABLE 1 – Algorithme de détermination des frontières.

2.2.1 Ajustement de surface NURBS sur les frontières

Des surfaces paramétriques de type NURBS (Non-Uniform Rational B-Spline [7]) sont utilisées pour ajuster le set de points correspondant aux frontières des grains. Les surfaces NURBS sont définies par l'équation en fonction des coordonnées paramétriques (u, w) :

$$\bar{Q}(u, w) = \sum_{i=1}^{n+1} \sum_{j=1}^{m+1} \bar{B}_{i,j}^h N_{i,k}(u) N_{j,l}(w) \quad (4)$$

où les B^h sont les points de contrôle donnés, m, n le nombre de noeuds, k, l le degré de la "NURBS", les N des coefficients calculés selon l'algorithme de Cox-de Boor, et u, w les paramètres.

L'utilisation d'un outil de CAO tel que CATIA permet à partir d'un ensemble de splines fermées et de points sur une surface de déterminer une surface NURBS par minimisation. La figure 4 fournit un exemple de deux grains voisins générés par une tessellation de Voronoï (à gauche) conduisant à une morphologie polyédrique convexe et par la méthode présentées ici (à droite) permettant de restituer des frontières plus complexes.

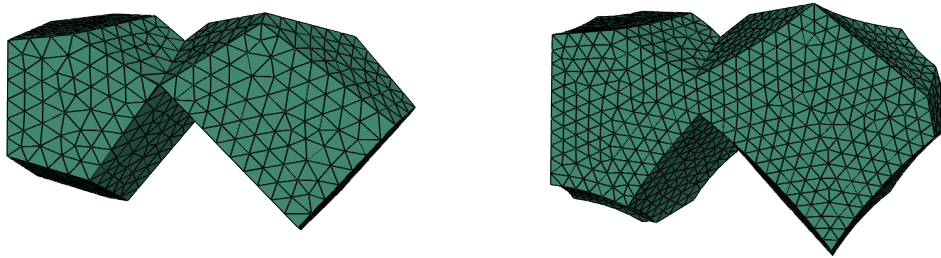


FIGURE 4 – Comparaison des morphologies de grains générés : Voronoï (à gauche), méthode des sphères reconstruites avec les surfaces NURBS (à droite).

3 Simulations numériques

3.1 Définition du modèle

L'agrégat 3D reconstruit avec les surfaces NURBS a été importé dans le code éléments finis ABAQUS. Afin d'en discuter la pertinence, il a été comparé à d'autres agrégats générés par différentes méthodes. Quatre agrégats ont été étudiés (figure 5). Le premier (fig. 5.a) comporte 32 grains identiques hexagonaux extrudés dans la profondeur, de façon similaire à [8]. Le second (fig. 5.b) résulte directement de l'extrusion de la cartographie EBSD de la figure 1 après avoir polygoniser la frontière des grains. Le troisième agrégat (fig. 5.c) correspond à une structure 3D de Voronoï générées en prenant le centre des sphères représentées en figure 3 comme distribution de germes. Le quatrième correspond à l'agrégat reconstruit par la méthode présentée dans la section précédente (fig. 5.d). On notera que seuls les deux derniers agrégats offrent une description véritablement tridimensionnelle de la microstructure (ils mettent en jeu 36 grains de surface et 135 grains de volume) tandis que les deux premiers correspondent à une représentation bidimensionnelle extrudée dans la troisième direction.

Les conditions aux limites suivantes ont été employées afin de rendre compte du chargement cyclique à déformation totale imposée : $u_x(x = L_x) = u_x^d(t)$, $u_x(x = 0) = u_y(y = 0) = u_z(z = 0) = 0$. Une condition de déplacement uniforme selon y est imposée sur la face définie par l'équation $y = L_y$. Enfin, la face

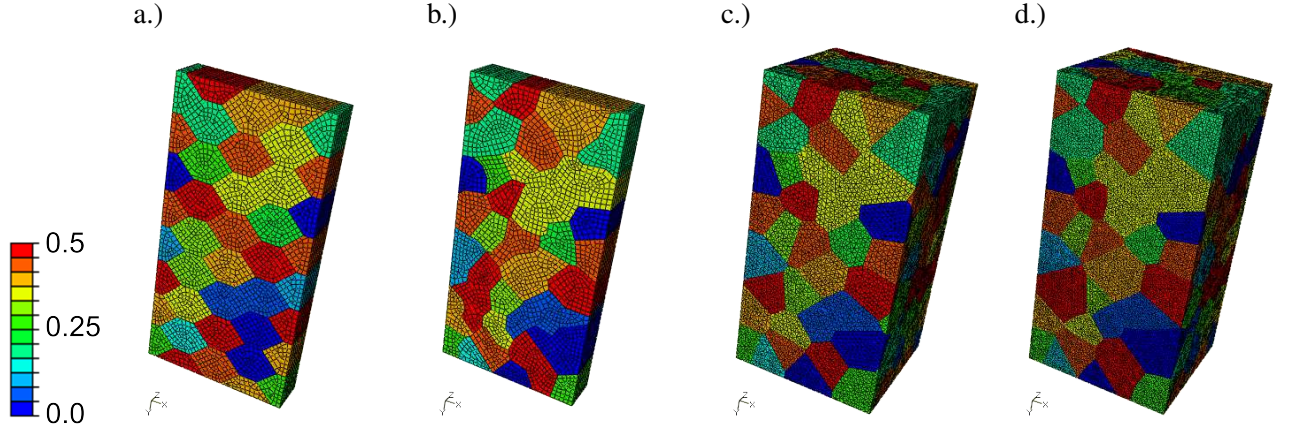


FIGURE 5 – Représentation des quatre agrégats étudiés. Facteur de Schmid maximum sur les trois systèmes de glissement basal.

$z = L_z$ est libre de charge ; elle correspond à la surface libre de l'éprouvette où l'observation par EBSD est effectuée. L_x , L_y et L_z désignent les dimensions de l'agrégat dans les directions x , y et z , respectivement. Le paramètre de chargement $u_x^d(t)$ suit un profil cyclique triangulaire de valeur minimale nulle (rapport de charge R nul) et de valeur maximale fixée de manière à imposer aux agrégats une déformation totale de 0.8 %. Les simulations réalisées comportent 10 cycles, la durée d'un cycle étant fixée à une seconde.

3.2 Plasticité cristalline

Une loi de comportement élasto-visco-plastique monocristalline est utilisée pour décrire la réponse mécanique de chaque grain en fonction de son orientation cristalline décrite par trois angles d'Euler. Le modèle utilisé est celui mis en oeuvre par [8] pour les alliages de Titane présentant une cristallographie hexagonale compacte. La loi d'écoulement viscoplastique décrivant l'évolution du glissement plastique $\dot{\gamma}^\alpha$ sur le système de glissement α est :

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left\langle \frac{|\tau^\alpha - x^\alpha| - \tau_0^\alpha - \kappa^\alpha}{D} \right\rangle^n \cdot \text{signe}(\tau^\alpha - x^\alpha) \quad (5)$$

où les variables κ^α et x^α décrivent respectivement l'écrouissage isotrope non-linéaire et l'écrouissage cinématique non-linéaire (de type Armstrong-Fredrick) sur le système de glissement α .

La cission résolue (ou réduite) τ^α sur le système de glissement α est donnée par la relation suivante :

$$\tau^\alpha = \sigma_{ij} m_{ij}^\alpha \quad (6)$$

où m_{ij}^α est le tenseur d'orientation relatif au système de glissement α . Il dépend des trois angles d'Euler et des deux vecteurs unitaires définissant la direction de glissement et la normale au plan de glissement qui forment le système α . Le présent modèle inclut 3 systèmes de glissement basal, 3 systèmes de glissement prismatique et 18 systèmes de glissement pyramidal de 1^{ère} et 2^{ème} espèce.

La relation entre les vitesses de glissement $\dot{\gamma}^\alpha$ et le tenseur des taux de déformation plastique est :

$$L_{ij}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^\alpha m_{ij}^\alpha \quad (7)$$

L'implémentation numérique des lois de comportement dans ABAQUS s'effectue via un sous-programme utilisateur UMAT. Un schéma d'intégration local implicite a été adopté ; il inclut une sous-incréméntation par rapport au schéma numérique implicite global. Le lecteur trouvera une présentation plus détaillée du modèle et de son implémentation numérique dans [8] et dans les références qui y sont mentionnées. Les valeurs des paramètres utilisés sont les mêmes que celles reportés dans [8].

4 Résultats

La figure 6 représente la répartition de la déformation plastique équivalente cumulée sur la face libre des quatre agrégats étudiés, au terme des dix cycles simulés.

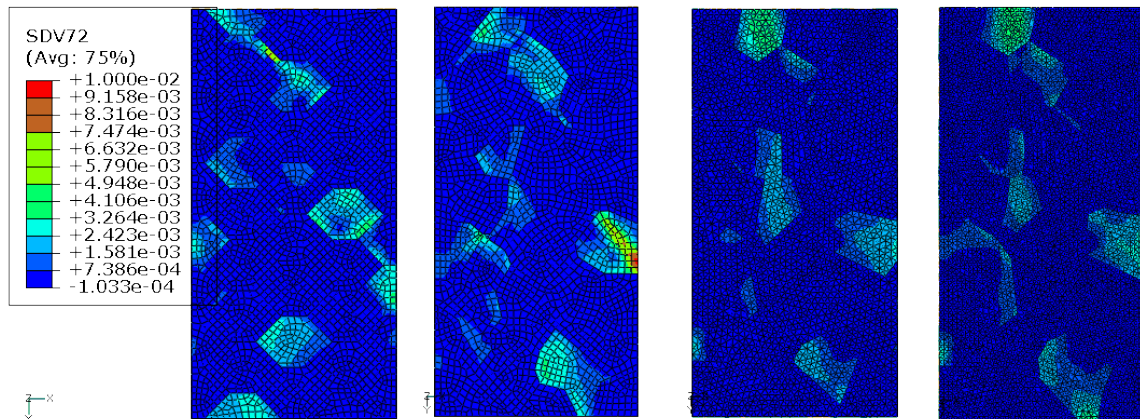


FIGURE 6 – Déformation plastique équivalente cumulée à 10 cycles sur la face libre des quatre agrégats étudiés : (de gauche à droite) grains hexagonaux extrudés, carte EBSD extrudées, structure de Voronoï 3D, structure générées par la méthode des sphères et reconstruite par les surfaces NURBS.

Sur les quatre agrégats, les grains de surface qui présentent une activité plastique sont les mêmes. En revanche, les différences notables observées sur l'intensité du glissement illustrent l'influence de la morphologie des grains et de la présence des grains de volume.

Afin d'obtenir des données quantitatives plus globales sur l'agrégat, i.e. ne se limitant pas à la face libre, la moyenne volumique du glissement plastique par grain a été calculée à la fin de chaque cycle. La figure 7 reporte, pour chaque agrégat, l'évolution du pourcentage de grains pour lesquels cette valeur est supérieure à 10^{-3} .

On remarque que le glissement basal est largement prépondérant, ce qui est effectivement observé mais dans des proportions plus faibles. Le glissement basal est sans doute favorisé ici par le tirage particulier des orientations cristallines qui porte sur un nombre de grains trop réduit pour être représentatif. Le glissement prismatique est activé dans des proportions beaucoup plus faibles. Les histogrammes de la figure 7 n'indiquent pas la présence de glissement pyramidal bien qu'il soit activé à des niveaux de glissement largement inférieurs et de manière localisée dans quelques grains.

Enfin, une cinquième simulation a été réalisée sur le même agrégat que celui représenté en figure 5.d (i.e. généré par la méthode des sphères et reconstruit par les surfaces NURBS), mais en affectant aux grains de volume des orientations cristallines différentes de celles utilisées précédemment sur le même agrégat (cf. figure 6 à droite). La figure 8 compare les résultats obtenus au bout de dix cycles sur la face libre - pourtant identique - des deux agrégats.

Dans les deux cas, le glissement plastique s'active en surface au sein des mêmes grains favorablement orientés, mais il apparaît des différences notables dans la répartition du glissement et son intensité à l'intérieur de chaque grain. Ce résultat illustre l'influence des orientations cristallines des grains de volume, ce qui motive l'usage d'une description tridimensionnelle de la microstructure. Cependant, une meilleure compréhension de ce phénomène, ainsi que sa quantification, nécessitera une analyse plus poussée, qui devra être réalisée sur plusieurs agrégats de plus grandes dimensions (i.e. comportant un plus grand nombre de grains) afin d'obtenir des résultats statistiquement représentatifs.

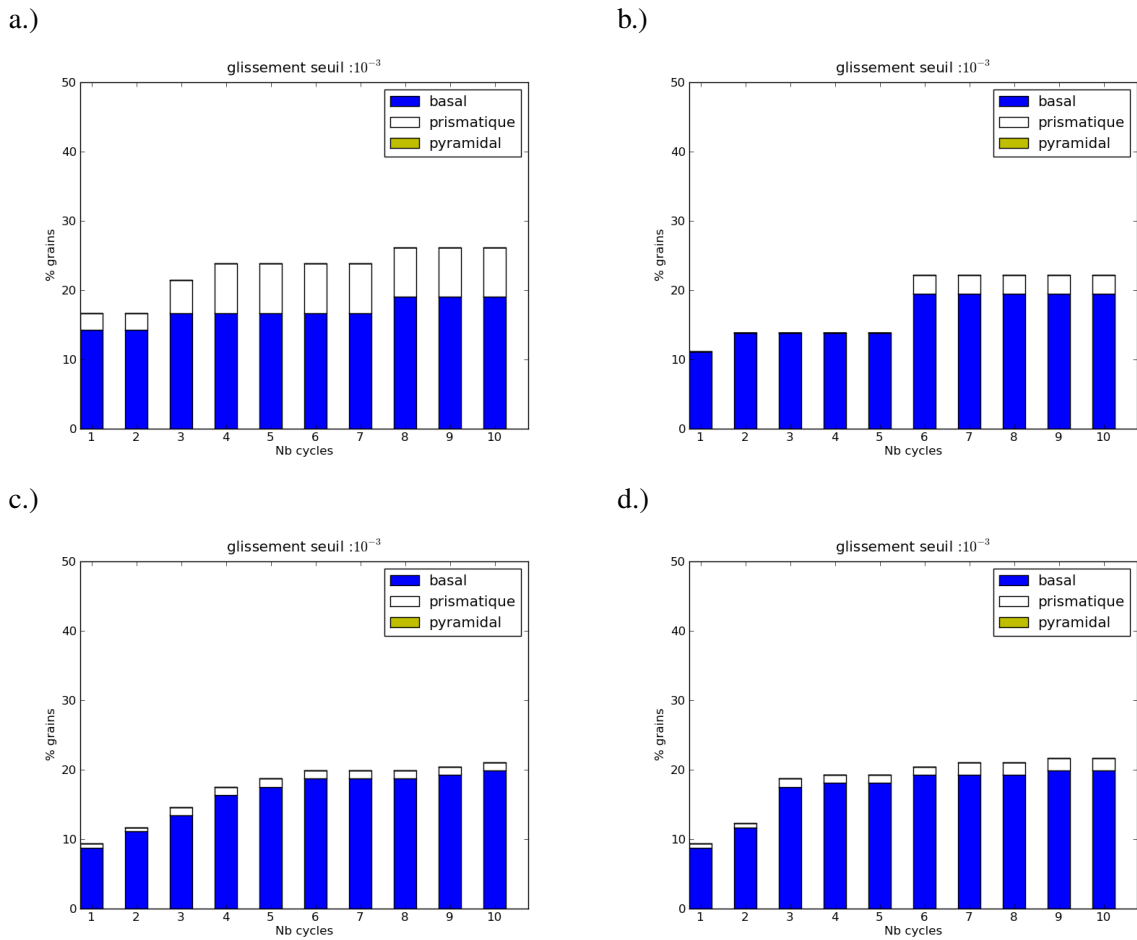


FIGURE 7 – Evolution au cours des cycles du pourcentage de grains présentant une moyenne volumique du glissement plastique supérieure à 10^{-3} : (a) grains hexagonaux extrudés, (b) carte EBSD extrudées, (c) structure de Voronoï 3D, (d) structure générées par la méthode de sphère et reconstruite par les surfaces NURBS.

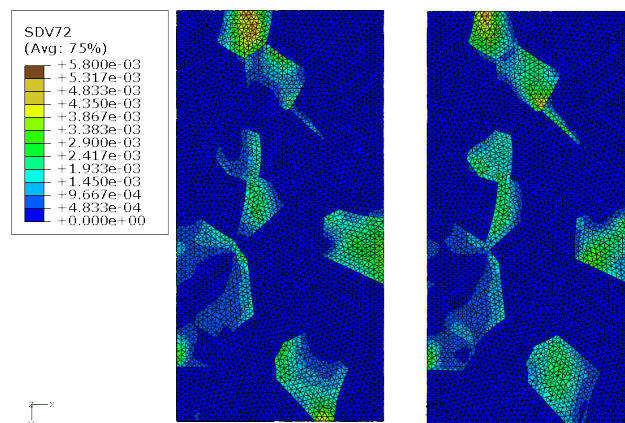


FIGURE 8 – Déformation plastique équivalente cumulée au bout de 10 cycles sur la face libre de deux agrégats de même morphologie, mais dont les grains de volume présentent des orientations cristallines différentes.

5 Conclusion

Les travaux présentés dans cet article concernent les méthodes de génération et de reconstruction d'agrégats polycristallins tridimensionnels afin d'étudier, par la simulation numérique, les micromécanismes de déformation plastique qui s'y développent sous sollicitation cyclique.

La méthode proposée consiste à disposer un ensemble de sphères dans le volume de l'agrégat pour définir le domaine occupé par chaque grain, puis de reconstruire la morphologie des grains à l'aide d'outils CAO (surfaces NURBS). L'agrégat polycristallin 3D ainsi défini présente deux caractéristiques importantes : i) l'une de ces faces correspond à une cartographie EBSD observée expérimentalement, et, ii.) les entités géométriques des grains sont décrites explicitement (contrairement aux méthodes basées sur la voxelisation de la boîte d'étude), ce qui permet d'obtenir des morphologies plus réalistes des grains que les méthodes de type voronoï. La principale perspective consistera à utiliser des ellipsoïdes au lieu des sphères. En effet, l'utilisation d'ellipses en 2D pour reconstruire la couche de surface s'est révélée adaptée et son application à la description des grains de volume semble prometteuse. Les travaux futurs incluront le développement d'outils pour mieux analyser et contrôler les statistiques géométriques et cristallographiques des agrégats générés.

Les simulations numériques par éléments finis réalisées visaient à démontrer l'influence de la description morphologique de l'agrégat sur l'activité plastique qui s'y développe, notamment en surface, lors d'un chargement cyclique. Pour cela, les résultats obtenus avec l'agrégat généré par la méthode proposée par les auteurs ont été comparés à ceux obtenus avec d'autres types d'agrégats (agrégat bidimensionnel extrudé, structure de type Voronoï). Bien que l'activité plastique se développe sur les mêmes grains favorablement orientés, l'influence de la morphologie et de la présence de grains de volume se manifeste clairement sur la répartition intra-granulaire du glissement et sur son intensité. Ces résultats préliminaires motivent la conduite d'études plus poussées, sur de plus gros agrégats (donc plus représentatifs) pour capter plus clairement, et de façon plus quantitative, ces effets morphologiques et cristallographiques.

6 Références bibliographiques

Références

- [1] BARBE , F., DECKER L., JEULIN, D. CAILLETAUD, G. (2001). Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : FE model . *Int J. of Plasticity*. **17/4**, 513–536.
- [2] CAILLETAUD, G. ET AL.. (2001). Some elements of microstructural mechanics *Comp. Materials Sci* **27**, 351–374.
- [3] C. GÉRARD (2008). Mesures de champ et identification de modèles de plasticité cristalline. *Thèse université Paris XIII*.
- [4] DINGREVILLE, R.. AND AL. (2009).The effect of microstructural representation on simulations of microplastic ratcheting . *Int J of Plasticity*. In press.
- [5] SIDDIQ QIDWAI MA., LEWIS AC. , GELTMACHER AB. (2009).Using image-based computational modeling to study microstructure-yield correlations in metals . *Acta Materialia*. In press.
- [6] ST-PIERRE, L., HÉRIPRÉ, E., DEXET, M., CRÉPIN, J., BERTOLINO, G. AND BILGER, N. (2008). 3D simulations of microstructure and comparison with experimental microstructure from OIM analysis. *Int J. of Plasticity*. **24**, 1516–1532.
- [7] GHOSH, S., BHANDARI, Y., AND GROEBER, M. (2008). CAD-based reconstruction of 3D polycrystalline alloy microstructures from FIB generated serial sections. *Computer-Aided Design*. **40**, 293–310.
- [8] BRIDIER, F. AND AL. (2009). Crystal plasticity modeling of slip activity in Ti-6Al-4V under high cycle fatigue loading. *Int J of Plasticity*. **25**, 1066–1082.