CSMA 2011
10e Colloque National en Calcul des Structures
9-13 Mai 2011, Presqu'île de Giens (Var)

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

M. Guéguen[1], L . Signor[1], J. Dumoncel[1], P. Villechaise[1]

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

Résumé —
Les alliages métalliques utilisés pour les applications structurales présentent généralement une structure polycristalline multiphasique complexe. Le comportement mécanique et l'endommagement au sein de ces matériaux sont directement pilotés par les propriétés microstructurales. En complément des moyens d'observations tels que la microscopie électronique et les cartographies EBSD, 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 décrire correctement les phénomènes dans ces agrégats, il est nécessaire de développer en relation avec les observations expérimentales :

- une loi de comportement en plasticité cristalline cohérente pour prédire le comportement mécanique à l'échelle des grains ;
- une représentation précise et fidèle de la morphologie de la microstructure.

L'endommagement en fatigue se traduit généralement par une accumulation locale de la plasticité pouvant être à l'origine de l'amorçage d'une fissure, de sa propagation et de la rupture finale. Ce phénomène est directement lié aux hétérogénéités microstructurales que peuvent présenter les matériaux métalliques polycristallins et à la nature même des modes cristallins de déformation plastique (glissement, clivage, adoucissement, consolidation, effet de rochet, ...) et d'endommagement (amorçage de fissure, décohésion, clivage, ...). Ceci est d'autant plus vrai dans le cas de la fatigue à grand nombre de cycles, domaine de sollicitation cyclique en dessous de la limite d'élasticité macroscopique des matériaux et donc domaine privilégié d'utilisation des pièces structurelles. De manière à identifier les premiers mécanismes d'endommagements en fatigue, nous nous intéressons dans ce travail à traduire les observations expérimentales issues de cartographies EBSD dans un volume élémentaire représentatif d'un point de vue orientation cristalline, mais aussi d'un point de vue de la morphologie des grains.

La reconstruction proposée s'appuie sur la cartographie EBSD expérimentale en approximant les grains par des disques sur la surface[1]. Elle comprend 2 étapes : Positionnement des disques sur les grains (méthode des moindres carrés et critère de distance) ; Extraction et traitement des zones étiquetés. L'idée est ensuite de déterminer l'équation des frontières comprenant les points à équidistance entre chaque disque, et de déduire les points triples à partir de l'intersection entre ces frontières. A partir de ces points triples, nous identifions directement un polygone, ce qui permet d'obtenir une cartographie reconstruite très proche des données expérimentales, et plus réaliste que les méthodes de reconstruction de type Voronoï. Ce traitement est étendu directement au cas 3D pour la création des polyhèdres dans le volume en ajoutant un calcul discret pour la détermination des points triples et en approchant le contour par des splines formées par 3 points de contrôle.

A partir de la segmentation de l'agrégat et des contours déduits pendant la reconstruction, nous finalisons la construction de l'agrégat à partir d'outils CAO en se basant sur des surfaces NURBS pour caractériser les contours des grains, nous permettant de s'affranchir d'un maillage direct à partir de la voxelisation du volume[2]. Nous obtenons ainsi un volume possédant une face semblable à la cartographie expérimentale et une morphologie 3D des grains représentative des données issues de celle-ci. Les données cristallographiques de l'agrégat sont quant à elles directement déduites de la statistique de la cartographie expérimentale.

Cette représentation tridimensionnelle nous permet de conserver au mieux les statistiques d'observations expérimentales tant morphologique que cristallographique.

En complément de la reconstruction proposée, un modèle de plasticité cristalline est développé. Ce modèle est basé sur une approche classique en terme de cinématique et sur une loi d'écoulement viscoplastique exprimant la vitesse de glissement pour chaque système de glissement en fonction de la cission résolue sur le même système de glissement. Dans le cas des applications aux alliages de titane, les valeurs des cissions résolues critiques pour chaque famille de systèmes de glissement sont basées sur des estimations faites à partir d'observations par microscopie électronique à balayage pendant un essai de traction in-situ. A défaut d'information plus précise sur le comportement local du monocristal, les paramètres d'écrouissage (isotrope et cinématique) ont été choisis de façon à restituer le comportement macroscopique de l'agrégat, présentant notamment un adoucissement cyclique[3].

Des simulations d'essais de fatigue ont été réalisées. Les conditions aux limites en déplacements imposés correspondent à une configuration d'essai piloté en déformation totale $(0,6-1\%)$ suivant un profil triangulaire avec une fréquence de 1Hz et un rapport de déformation totale de R=0. Les calculs rendent compte de manière satisfaisante du comportement cyclique macroscopique. Les premiers résultats obtenus sur la nature et la distribution des systèmes de glissement activés sont également cohérents. Les résultats présentés viseront à mettre en évidence l'influence de différents paramètres, comme la morphologie des grains, la distribution des orientations cristallines, le comportement ou les conditions aux limites.

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

0.1 Références bibliographiques

Références

[1] 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.

[2] GHOSH, S., BHANDARI, Y., AND GROEBER, M. (2008). CAD-based reconstruction of 3D polycristalline alloy microstrcutures from FIB generated serial sections. *Computer-Aided Design.* **40,** 293–310.

[3] 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.