



**HAL**  
open science

## Simulation par éléments finis de la déformation de polycristaux à partir d'images de tomographie par contraste de diffraction

Henry Proudhon, Michael Herbig, P. Reischig, Jean-Yves Buffiere, Wolfgang Ludwig

► **To cite this version:**

Henry Proudhon, Michael Herbig, P. Reischig, Jean-Yves Buffiere, Wolfgang Ludwig. Simulation par éléments finis de la déformation de polycristaux à partir d'images de tomographie par contraste de diffraction. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. 7 p. hal-00592918

**HAL Id: hal-00592918**

**<https://hal.science/hal-00592918>**

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.

## Simulation par éléments finis de la déformation de polycristaux à partir d'images de tomographie par contraste de diffraction

H. Proudhon<sup>1</sup>, M. Herbig<sup>2,3</sup>, P. Reischig<sup>3,4</sup>, J.-Y. Buffière<sup>2</sup>, W. Ludwig<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> MINES ParisTech, Centre des matériaux, CNRS UMR 7633, BP 87, F-91003 Evry Cedex, France, henry.proudhon@mines-paristech.fr

<sup>2</sup> Université de Lyon, INSA-Lyon, MATEIS CNRS UMR 5510, 69621 Villeurbanne, France, jean-yves.buffiere@insa-lyon.fr

<sup>3</sup> European Synchrotron Radiation Facility, 6 rue J. Horowitz, 38043 Grenoble, France, {ludwig,herbig}@esrf.eu

<sup>4</sup> Institute for Synchrotron Radiation, Karlsruhe Institute of Technology, Eggenstein-Leopoldshafen, Germany, reischig@esrf.eu

**Résumé** — La tomographie par contraste de diffraction donne accès à la forme, l'orientation et l'état de déformation élastique des grains dans des volumes polycristallins pouvant contenir à l'heure actuelle jusqu'à mille grains. La combinaison de cette technique avec la méthode des éléments finis est particulièrement prometteuse pour analyser le rôle de la cristallographie locale sur les mécanismes de déformation et de dégradation dans des matériaux polycristallins. Dans ce travail, un échantillon polycristallin de titane est imagé en 3D puis maillé et sa déformation de traction est calculée par éléments finis.

**Mots clés** — tomographie par contraste de diffraction, maillage de microstructure, éléments finis, plasticité cristalline.

### 1 Imagerie 3D en tomographie par contraste de diffraction

La micro tomographie par contraste de diffraction (DCT) est une technique d'imagerie synchrotron permettant de visualiser simultanément la microstructure visible en mode d'absorption (e.g. les différentes phase possédant des numéros atomiques ou des densités différentes) et la microstructure cristalline (taille, forme et orientation des grains) d'un matériau polycristallin. Réunissant les principes de la reconstruction d'image à partir des projections (tomographie) et de l'imagerie par diffraction X, cette technique donne accès à l'orientation (valeur moyenne par grain) et à la forme 3D des grains au sein des matériaux polycristallins, avec des limites liées à l'état de déformation du matériau [?, ?]. L'illumination par un faisceau monochromatique étendu (2D) réduit la procédure d'acquisition à une rotation autour d'un axe et se traduit par des temps d'acquisition de l'ordre d'une heure pour des volumes contenant typiquement un nombre de grains compris entre cent et mille grains (voir Fig. 1).

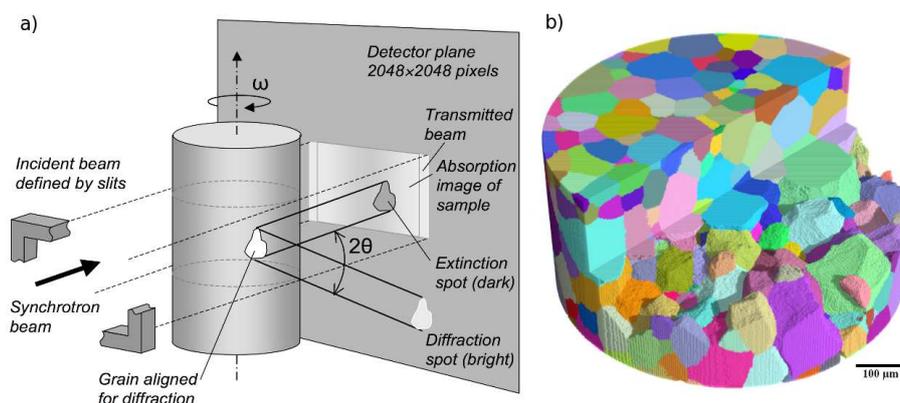


FIG. 1 – a) Principe de la tomographie par contraste de diffraction. Lors de la rotation chaque grain donne lieu à une série de tâches de diffraction. La position et la forme de ces tâches permettent de remonter à la forme 3D et à l'orientation des grains. L'image d'absorption au centre du détecteur permet de reconstruire la distribution 3D du coefficient d'atténuation dans l'échantillon. b) Exemple de reconstruction tridimensionnelle d'un polycristal de Titane, obtenu par DCT [?].

## 2 Maillage tridimensionnel de la microstructure d'un alliage de titane à partir des images de tomographie

La caractérisation par DCT donne accès à la forme et à l'orientation de l'ensemble des grains d'un échantillon polycristallin. À partir de ces images, un avatar numérique de l'échantillon peut être recréé pour être ensuite soumis par la méthode des éléments finis à différentes sollicitations. Une procédure relativement automatique faisant appel à un algorithme de *marching cubes* multi-matériau [?] permet de reconstruire les joints de grains avec des éléments coques linéaires. Cette interface peut ensuite être utilisée en entrée d'un mailleur 3D (par exemple le logiciel tetgen/GHS3D) pour obtenir un maillage tétraédrique complet prêt pour le calcul par éléments finis. Une étape de simplification est réalisée avant la construction volumique du maillage, ce qui permet de contrôler la densité finale des éléments. Ce procédé est représenté dans la Fig. 2 sur un échantillon cylindrique de 600 micromètres de diamètres fait d'un alliage de titane quasi- $\beta$ .

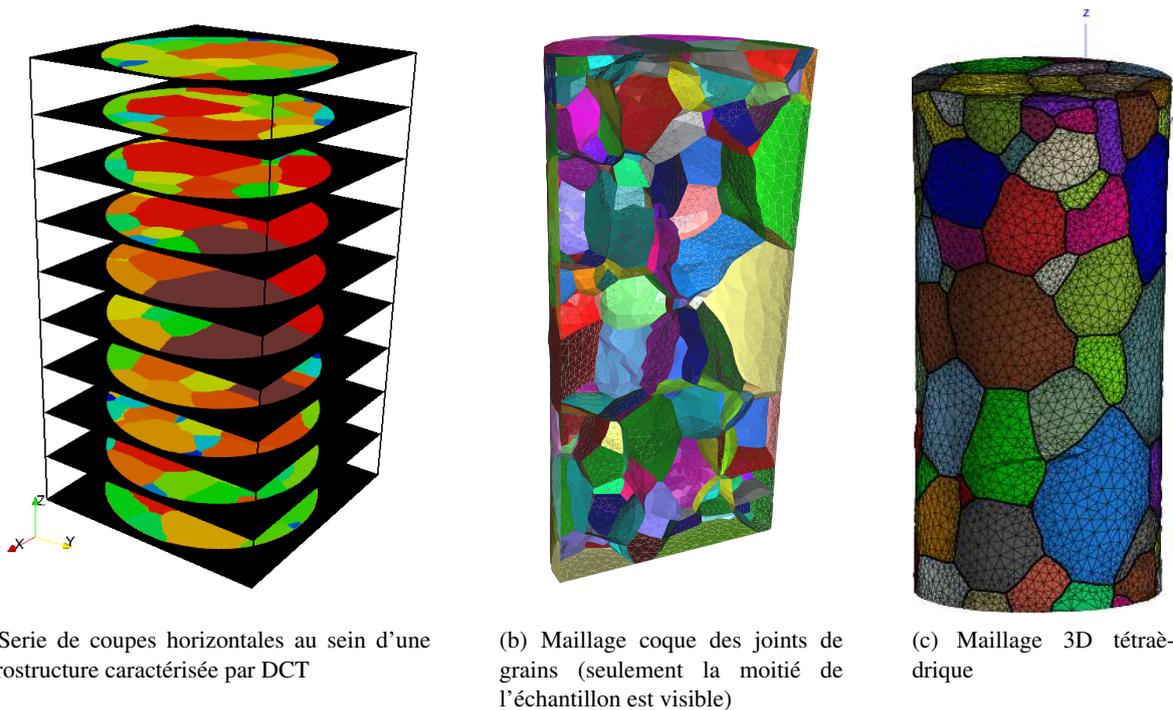


FIG. 2 – Génération du maillage 3D d'un échantillon polycristallin d'alliage de titane imagé par tomographie en contraste de diffraction (les champs de couleurs ne sont pas identiques d'une image à l'autre).

## 3 Modèle de plasticité cristalline

### 3.1 Élasticité du cristal

Le tenseur d'élasticité permet de relier les contraintes et les déformations élastiques :  $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl}$ . L'alliage de titane Timetal 21S est un alliage monophasé  $\beta$  avec la composition Ti-15Mo-3Nb-3Al-2Si avec une structure cubique centré. Le tenseur des rigidités est réduit à trois paramètres indépendants (à comparer à deux pour le cas isotrope) qui sont donnés pour une orientation du cristal coïncidente avec le repère cartésien. Ces paramètres ont été mesurés par diffusion inélastique des rayons X [?], sur ID28 à l'ESRF et sont reportés dans le Tab. 1.

### 3.2 Plasticité cristalline

Vue à l'échelle du cristal, la plasticité macroscopique des matériaux métalliques peut s'expliquer par le glissement de dislocations dans les plans denses du matériaux. Ces plans cristallographiques sont en fait des familles de plans, par exemples la famille  $\{111\}$  dans les cristaux cubiques à faces centrées

TAB. 1 – Mesure en MPa des coefficients d'élasticité cubique de l'alliage de titane Timetal 21S par diffusion inélastique des rayons X.

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline C_{1111} & C_{1122} & C_{1212} \\ \hline 153000 & 101000 & 57000 \\ \hline \end{array}$$

(CFC) et les familles {110}, {112} et {123} dans les cubiques centrés (CC) comme l'alliage de titane qui nous intéresse ici. Connaissant la forme et l'orientation d'un cristal (ou des chacun des cristaux d'un polycristal), il est alors possible de décrire le comportement du matériau par un modèle continu de plasticité cristalline de Méric-Cailletaud [?, ?, ?].

Se plaçant dans un grain, on considère une collection de systèmes de glissement de normale  $\underline{\mathbf{n}}^s$ , de direction de glissement  $\underline{\mathbf{l}}^s$ . Le tenseur d'orientation pour le système  $s$  est défini par :

$$\underline{\mathbf{m}}^s = \frac{1}{2}(\underline{\mathbf{n}}^s \otimes \underline{\mathbf{l}}^s + \underline{\mathbf{l}}^s \otimes \underline{\mathbf{n}}^s)$$

et la contrainte de cisaillement résolue dans le plan (loi de Schmid) s'écrit  $\tau^s = \underline{\boldsymbol{\sigma}} : \underline{\mathbf{m}}^s$ .

Le modèle mécanique se résume alors en quelques équations, écrites ici dans l'hypothèse des petites perturbations. On utilise une formulation viscoplastique, avec une loi de Norton, pour définir une fonction de charge  $f^s$  sur chaque système de glissement. La fonction de charge va dépendre de la contrainte de cisaillement  $\tau^s$  évaluée dans le plan de glissement et de l'état d'écrouissage :  $f^s = |\tau^s - X^s| - R^s$ . Les lois d'écrouissage cinématique  $X^s$  et isotrope  $R^s$  font respectivement intervenir les variables d'état  $\alpha^s$  et  $r^s$  :

$$\begin{aligned} X^s &= C\alpha^s & \dot{\alpha}^s &= (\eta^s - D\alpha^s)\dot{\nu}^s \\ R^s &= R_0 + Q \sum_j h_{sj} r^j & \dot{r}^j &= (1 - br^j)\dot{\nu}^j \end{aligned}$$

les coefficients  $C$ ,  $D$ ,  $R_0$ ,  $Q$ ,  $b$  et les termes de la matrice d'interaction  $h_{ij}$  étant à déterminer. Dans le cas d'un écrouissage cinématique linéaire considéré ici,  $D = 0$  et  $\dot{\alpha}^s = \eta^s \dot{\nu}^s = \dot{\gamma}^s$ . La variable d'état de l'écrouissage cinématique sur le système  $s$  n'est autre que  $\gamma^s$ . Enfin on déduit la vitesse de déformation plastique  $\underline{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}}^p$  à partir du glissement dans chaque plan :

$$\begin{aligned} \dot{\nu}^s &= \left\langle \frac{f^s}{K} \right\rangle^n \\ \dot{\gamma}^s &= \dot{\nu}^s \text{signe}(\tau^s - X^s) = \dot{\nu}^s \eta^s \\ \underline{\dot{\boldsymbol{\epsilon}}}^p &= \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\mathbf{m}}^s \end{aligned}$$

### 3.3 Identification des paramètres de la loi cristalline

Une fois les constantes élastiques mesurées, le modèle de plasticité cristalline introduit 4 paramètres ( $R_0$ ,  $Q$ ,  $b$  et  $C$ ) pour chaque famille de plans cristallins pris en compte. Dans cette étude, seul le glissement {110}, avec ses 12 systèmes  $\langle 111 \rangle$ , est pris en compte. L'identification réalisée est simplifiée dans la mesure où une seule courbe de traction est utilisée pour l'ensemble des coefficients. On suppose de plus un écrouissage de Taylor pour la matrice d'interaction entre les différents systèmes de glissement :  $h_i = 1.0$ .

L'identification est réalisée à partir d'un schéma d'homogénéisation explicite de Berveiller-Zaoui (BZ) [?] permettant de calculer la réponse macroscopique du polycristal très rapidement (par rapport à un calcul en champ complet) et facilitant ainsi l'utilisation d'un optimiseur sur les coefficients ( $R_0$ ,  $Q$ ,  $b$  et  $C$ ). Dans un calcul avec un modèle à champ moyen, un grain est caractérisé uniquement par son orientation cristalline. Tous les grains de même orientation sont donc réunis dans une phase  $i$  à laquelle on associe une fraction volumique  $f_i$ . On peut relier les tenseurs de contrainte et de déformation plastique macroscopiques  $\underline{\boldsymbol{\Sigma}}$  et  $\underline{\boldsymbol{E}}^p$  avec les valeurs locales (moyennes par grains) :

$$\underline{\boldsymbol{\Sigma}} = \sum_i f_i \underline{\boldsymbol{\sigma}}^i \quad (1)$$

$$\underline{E}^p = \sum_i f_i \underline{\varepsilon}^{p,i} \quad (2)$$

La transition d'échelle est assurée par une équation rendant compte de l'accomodation plastique entre les phases :

$$\underline{\sigma}^i = \underline{\Sigma} + \mu \beta (\underline{E}^p - \underline{E}^{p,i}) \quad (3)$$

La fonction  $\beta$  évolue avec la déformation plastique totale, elle vaut 1 avant toute plasticité et diminue jusqu'à environ 0.01 en plasticité étendue.

Muni de ce modèle à champs moyen, on optimise les coefficients ( $R_0$ ,  $Q$ ,  $b$  et  $C$ ) pour décrire au mieux les mesures expérimentales (cf. Fig. 3). Les valeurs des coefficients retenues sont données dans le Tab. 2.

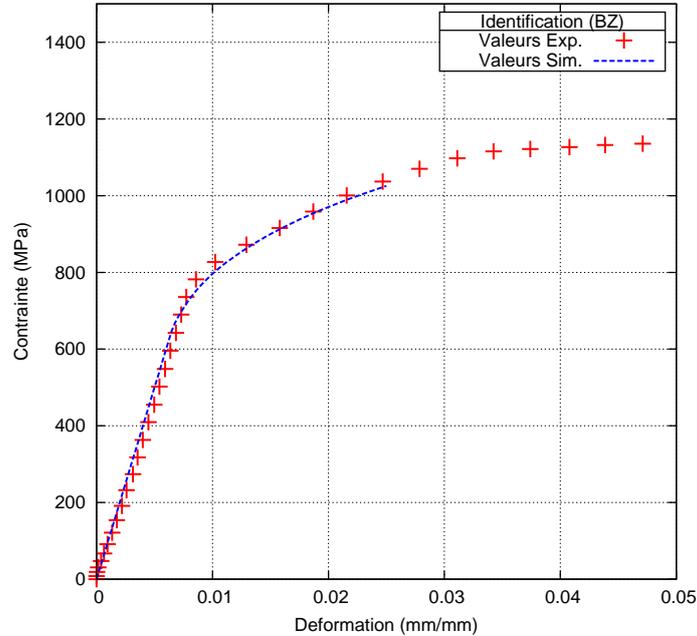


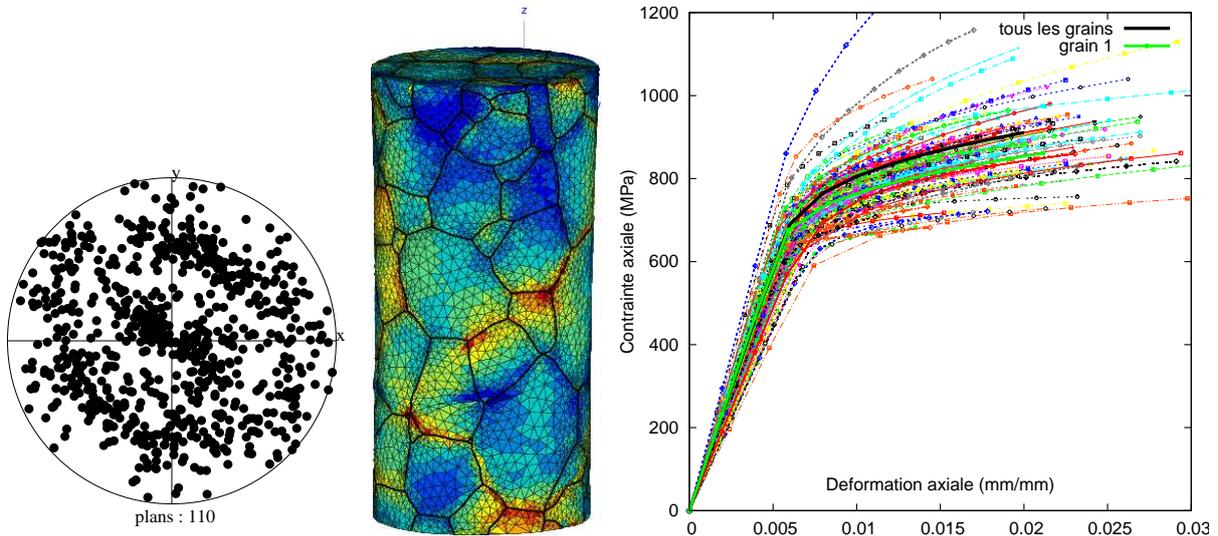
FIG. 3 – Identification du comportement de l'alliage Timetal 21S, optimisation des coefficients de la loi polycristalline en utilisant une estimation explicite de Berveiller-Zaoui sur 40 grains d'orientation aléatoire (seul le glissement dans les plans  $\{110\}$  est pris en compte).

TAB. 2 – Coefficients de plasticité cristalline identifiés par optimisation sur 40 grains avec un modèle de localisation de Berveiller-Zaoui ( $R_0$ ,  $Q$ ,  $C$  en MPa).

|       |     |     |      |          |
|-------|-----|-----|------|----------|
| $R_0$ | $Q$ | $b$ | $C$  | $h_{ij}$ |
| 320   | 60  | 242 | 4000 | 1        |

## 4 Calculs par éléments finis

Une fois que l'on possède la description de la microstructure d'une éprouvette complète et muni du modèle de plasticité cristalline présenté en section 3, il devient alors possible d'utiliser la simulation au plus proche de l'expérience, en incorporant les effets de la microstructure. Des telles comparaisons directes entre expérience et simulation sont encore très rares en 3D. Dans ce travail, on a simulé la traction d'une éprouvette de titane dont on connaît la géométrie et l'orientation de l'ensemble de ses grains (voir Fig. 4). La figure de pole (Fig. 4a) montre que l'éprouvette ne présente pas de texture particulière. Le calcul a été réalisé avec le maillage de la figure 2c qui comporte 65000 noeud et 368000 éléments linéaires tétraédriques. Les contraintes de von Mises calculées après une traction de 150 N (contrainte axiale moyenne de 500 MPa) sont visible sur le Fig. 4b et montrent clairement des hétérogénéités qui sont plutôt localisées près des joints de grains mais pas seulement.



(a) Figure de pole des 130 grains composant la zone d'intérêt de l'échantillon  
 (b) Contrainte de von Mises calculée ( $\bar{\sigma} = 500$  MPa)  
 (c) Comportement moyen de chaque grain comparé à celui du polycristal

FIG. 4 – Calcul 3D d'un échantillon polycristallin d'alliage de titane imagé par tomographie en contraste de diffraction ; dans l'expérience de traction, l'échantillon a été soumis à 150 N.

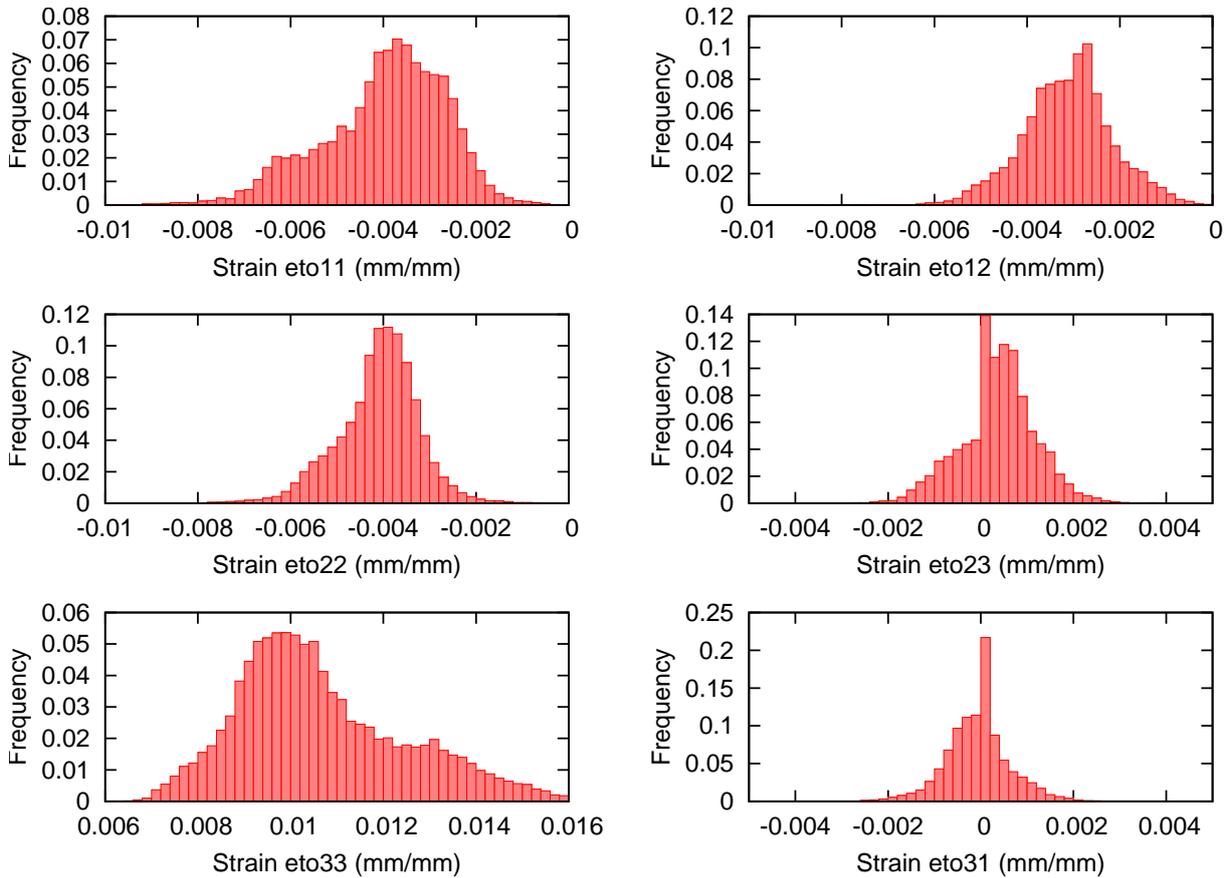


FIG. 5 – Distribution des 6 termes du tenseur des déformations, à 1% de déformation totale, dans le grain numéro 1.

Le calcul en champ complet permet non seulement d'accéder aux tenseurs de contraintes/déformations en chaque point de gauss du maillage de l'éprouvette. On peut également s'intéresser à la contrainte moyenne par grain et tracer celle-ci en fonction de la déformation moyenne de chaque grain comme illustré par la Fig. 4c. Ces courbes montrent une forte dispersion autour du comportement moyen de

l'éprouvette. Il sera extrêmement utile de comparer ces informations avec :

1. les prédictions des champs moyens par grains évaluées par un modèle auto-cohérent ;
2. les valeurs expérimentales obtenues grâce aux angles de diffraction pour ce qui concerne le tenseur des déformations élastiques.

Après le comportement global et les valeurs moyennes par grain, on peut enfin s'intéresser à l'hétérogénéité du champ au sein d'un grain en particulier. On a reporté sur la Fig. 5, la distribution des 6 termes du tenseur des déformations, à 1% de déformation totale. On peut clairement voir que les valeurs sont distribuées assez largement autour des moyennes de chaque composante. Par exemple pour la déformation totale axiale  $\epsilon_{33}$ , les valeurs sont distribuées entre 0.6% et 1.8% pour  $E_{33} = 1\%$ .

On retrouve une distribution de même nature (entre 1.2% et 3.6%) si l'on visualise ce champ à la surface du grain numéro 1 pour  $E_{33} = 2\%$ . Les valeurs minimales et maximales sont présentes à la surface ce qui tend à montrer que les incompatibilités de déformation aux joints de grains en fonction de l'orientation des voisins est un facteur important pour expliquer cette distribution.

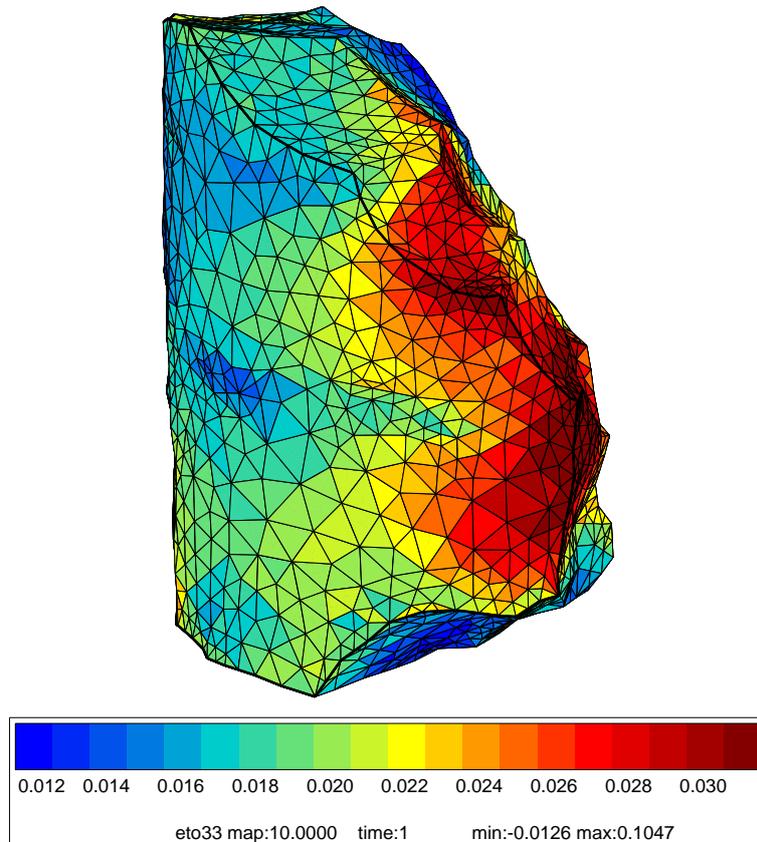


FIG. 6 – Visualisation des hétérogénéités de déformations axiales au sein du grain numéro 1, à 2% de déformation totale ; leur sévérité dépend de la géométrie et de l'orientation des grains voisins.

Il est aujourd'hui encore difficile de comparer ces valeurs locales au sein d'un grain à des mesures expérimentales. Des pistes existent, les rayons X avec leur capacité à pénétrer la matière étant les mieux placés pour réaliser de telles mesures. La microdiffraction X est la technique la plus aboutie aujourd'hui, elle est cependant limitée par la résolution spatiale (environ 1 micromètre) et ne donne en général accès qu'au tenseur déviateur. En utilisant en plus un faisceau cohérent de rayons X, on peut sonder le champ de déplacement d'un grain avec une résolution de quelques nanomètres [?].

#### 4.1 Conclusion

La tomographie par contraste de diffraction donne aujourd'hui accès à la forme et à l'orientation de l'ensemble des grains d'une éprouvette. Il est également possible d'évaluer de manière non destructive (donc *in situ*) le tenseur de déformation complet moyen par grain. Coupler cette technique de caractérisation avec la simulation par éléments finis en utilisant un modèle élastoplastique polycristallin est

très prometteur. On a alors accès à trois échelles : le comportement globale, moyen par grain et local à l'échelle du point de gauss. Pour réaliser ces simulations il est nécessaire de lever un certain nombre de verrous techniques, notamment en ce qui concerne le maillage (par exemple pour l'introduction de défauts comme des fissures) et la taille des calculs engendrés. Toutes les difficultés ont pu être levées pour mettre en œuvre les premiers calculs, l'effort doit maintenant se concentrer sur la *validation expérimentale des résultats*.

## **5 Remerciements**

Merci à Alexei Bosak pour avoir réalisé la mesure des constantes élastiques.