HAL
open science

Modélisation et simulation numérique par éléments finis de la déformation de matériaux métalliques nanocristallins

Yangcan Wu, Madani Yossi, Zhidan Sun, Benoît Panicaud, Delphine Retraint

To cite this version:

Yangcan Wu, Madani Yossi, Zhidan Sun, Benoît Panicaud, Delphine Retraint. Modélisation et simulation numérique par éléments finis de la déformation de matériaux métalliques nanocristallins. 13e colloque national en calcul des structures, Université Paris-Saclay, May 2017, Giens, Var, France. hal-01899321

HAL Id: hal-01899321

https://hal.science/hal-01899321

Submitted on 19 Oct 2018

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.

CSMA 2017
13ème Colloque National en Calcul des Structures
15-19 mai 2017, Presqu'île de Giens (Var)

Modélisation et simulation numérique par éléments finis de la déformation de matériaux métalliques nanocristallins

Y. Wu[1], M. Yossi[1], Z. Sun[1*], B. Panicaud[1], D. Retraint[1]

[1]Université de Champagne, Université de Technologie de Troyes (UTT) – CNRS, Institut Charles Delaunay (ICD) /LASMIS, 12 rue Marie Curie, 10004 Troyes, France

*Auteur correspondant : zhidan.sun@utt.fr

Résumé — Ce travail consiste à modéliser et simuler la déformation de matériaux nanocristallins. Un modèle de plasticité cristalline est utilisé pour décrire le comportement mécanique de chaque grain et joints de grains. Le comportement mécanique des joints de grains et celui des grains sont affectés à l'aide de la méthode Level-Set. Un VER (volume élémentaire représentatif) avec dix grains est créé avec le diagramme de Voronoï pour simuler la traction de matériaux nanocristallins. Deux modèles éléments finis avec différentes tailles de grains sont utilisés. Les résultats numériques sont confrontés aux résultats de la littérature.

Mots clefs — matériaux nanocristallins, plasticité cristalline, simulation numérique.

1. Introduction

Le très remarquable article rédigé par H. Gleiter en 1989 [1] a fait prendre une nouvelle direction aux efforts globaux de recherche en science des matériaux nanocristallins. Ces matériaux nanocristallins sont des poly-cristaux mono- ou multi-phases, avec des tailles de grains inférieures à 100 nm. En conséquence de ces dimensions extrêmement petites, les matériaux nanocristallins sont structurellement caractérisés par une fraction volumique importante de joints de grains ou d'interfaces (voir Fig.1) qui peuvent significativement modifier certaines de leurs propriétés physiques, mécaniques ou encore chimiques par rapport à leurs homologues conventionnels à grains de taille micrométrique. Ainsi, la plupart des propriétés des matériaux nanocristallins sont reconnues comme étant fondamentalement différentes et souvent supérieures, comparées à celles de ces derniers. Par exemple, Weertman et al. [2] ont observé que les résistances mécaniques du Cu et du Pd nanocristallins sont beaucoup plus élevées que celles des mêmes matériaux à grains micrométriques.

Grâce à leurs propriétés mécaniques intéressantes, une quantité significative de travaux de recherches essentiellement expérimentaux ont été effectués dans le monde entier pour comprendre les mécanismes de déformation des matériaux métalliques nanocristallins. Plusieurs hypothèses/modèles ont été proposées pour décrire les mécanismes de déformation. Bien qu'il existe toujours des désaccords sur les mécanismes de déformation, il est généralement considéré que les joints de grains jouent un rôle important ou dominant en termes de mécanisme de déformation des matériaux nanocristallins. De ce fait, le comportement des joints de grains doit être pris en compte pour modéliser la réponse mécanique des matériaux nanocristallins. Les codes éléments finis font maintenant partie des outils couramment utilisés lors de la conception et l'analyse de produits industriels. Leur utilisation se démocratise par la simplicité croissante de leur mise en œuvre, la fiabilité des algorithmes et la robustesse de la méthode. Leur mise en œuvre peut s'effectuer par différentes approches.

A travers ce travail, nous proposons une approche basée sur le couplage entre la plasticité cristalline et la méthode Level-Set. Le comportement mécanique des grains et des joints de grains est décrit par un même modèle de plasticité cristalline, mais avec différents niveaux de cission critique pour les grains et pour les joints de grains. L'intérêt de la plasticité cristalline est de mieux prendre en compte la microstructure, et d'introduire la notion de mécanisme élémentaire à l'échelle microscopique, responsable de la déformation inélastique. L'affectation de comportements mécaniques différents respectivement pour les grains et les joints de grains est réalisée à l'aide de la méthode Level-Set. Pour générer le modèle éléments finis qui comporte un certain nombre de grains, le diagramme de Voronoï est utilisé.

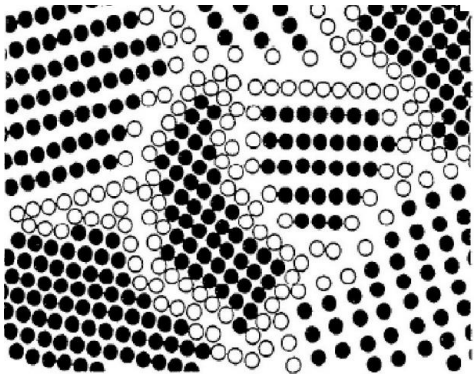

Figure 1- Exemple de structure atomique de matériaux nanocristallins montrant l'épaisseur non-négligeable des joints de grains (atomes blancs) par rapport aux grains (atomes noirs) [3].

2. Modélisation de la déformation de matériaux métalliques nanocristallins

2.1. Modèle de la plasticité cristalline

A l'échelle du cristal, la plasticité des matériaux métalliques peut s'expliquer par le mouvement de dislocations dans certains plans cristallographiques. Ces plans cristallographiques sont des familles de plans denses, par exemple la famille {111} dans les cristaux cubiques à faces centrées (CFC). Connaissant la géométrie et l'orientation de chaque grain d'un poly-cristal, il est possible de décrire le comportement du poly-cristal par un modèle continu de plasticité cristalline. Dans le cas d'une sollicitation quelconque, la contrainte de cisaillement est obtenue par la relation suivante :

$$\tau^s = \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} : \underline{\underline{\boldsymbol{m}}}^s \text{ avec } \underline{\underline{\boldsymbol{m}}}^s = \frac{1}{2}\left(\underline{\boldsymbol{n}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{l}}^s + \underline{\boldsymbol{l}}^s \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^s\right) \qquad \textbf{(1)}$$

$\underline{\underline{\mathbf{m}}}^s$ est le tenseur d'orientation qui exprime les caractéristiques géométriques du système de glissement s, $\underline{\boldsymbol{n}}^s$ et $\underline{\boldsymbol{l}}^s$ sont respectivement la normale unitaire au plan de glissement et la direction unitaire de glissement dans le plan. Selon la loi de Schmid, la contrainte de cisaillement résolue (cission résolue) dans le système s s'écrit $\tau^s = \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} : \underline{\underline{\boldsymbol{m}}}^s$. Dans ce travail, une formulation cinétique dépendante du temps, développée par Méric et Cailletaud [6], est utilisée. Le comportement mécanique se résume en quelques équations, écrites dans l'hypothèse des petites déformations. Dans ce modèle, le taux de glissement cristallographique $\dot{\gamma}^s$ pour le système s s'exprime par une fonction de puissance de la cission résolue τ^s comme suit :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{\left|\tau^s - \chi^s\right| - \kappa^s}{g} \right\rangle^n \operatorname{sgn}\left(\tau^s - \chi^s\right) \qquad \textbf{(2)}$$

où g et n sont les paramètres de viscosité ; n représente la dépendance du taux de déformation. Une forme d'écrouissage cinématique à l'échelle des systèmes de glissement a été inclue dans ce modèle. L'idée est d'introduire la notion de cission effective $\left(\tau^s - \chi^s\right)$ sur un système afin de tenir compte des interactions à longue distance entre dislocations :

Ecrouissage cinématique : $\chi^s = C\alpha^s$ avec $\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - D\left|\dot{\gamma}^s\right|\alpha^s$ **(3)**

L'évolution non linéaire de l'écrouissage isotrope décrit l'augmentation de la cission critique sur un système avec le glissement cumulé sur chacun des systèmes. Son expression introduit une matrice d'interaction h^{sr}.

Ecrouissage isotrope : $r^s = r_0 + bQ\sum_{r=1}^{N} h^{sr}\rho^r$ avec $\dot{\rho}^s = \left(1 - b\rho^s\right)\left|\dot{\gamma}^s\right|$ **(4)**

Le tenseur de la vitesse de déformation inélastique macroscopique est calculé à partir du glissement dans chaque système avec la relation suivante :

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p = \sum_{s=1}^{N} \dot{\gamma}^s \underline{\underline{\mathbf{m}}}^s \qquad \textbf{(5)}$$

Enfin, le tenseur d'élasticité permet de relier les contraintes de Cauchy et les déformations élastiques à l'aide de la loi de Hooke : $\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}$. Musienko [7] a identifié un jeu de paramètres se rapportant au cuivre, en s'appuyant sur des essais réalisés sur poly-cristaux (Tab. 1). Ces paramètres sont utilisés dans cette étude.

Tableau 1– Paramètres utilisés pour la simulation avec la loi de plasticité cristalline.

Tenseur d'élasticité (GPa)			**Vitesse**	**Viscosité**		**Ecr. isotrope**		**Ecr. cinématique**		**Matrice d'écr.**
C11	C12	C14	ϑ (s^{-1})	K ($MPa.s^{1/n}$)	n	B	Q (MPa)	C (MPa)	d	h^{sr}
168,4	121,4	75,4	1	**5**	10	15	6	4500	600	1

2.2. Diagramme de Voronoï

Le tout premier développement nécessaire à la modélisation des poly-cristaux consiste à mettre en place une structure composée de grains et de joints de grains. Le choix discuté est donc d'ordre purement géométrique et topologique. Il consiste à construire des cellules de Voronoï dans un carré en 2D. L'obtention d'un polyèdre de Voronoï passe classiquement par trois étapes :

1. La distribution aléatoire des germes dans un domaine D (Fig. 2a);

2. La triangulation de Delaunay [8] (Fig. 2b) sur laquelle repose la construction du polyèdre de Voronoï;

3. La génération des cellules de Voronoï.

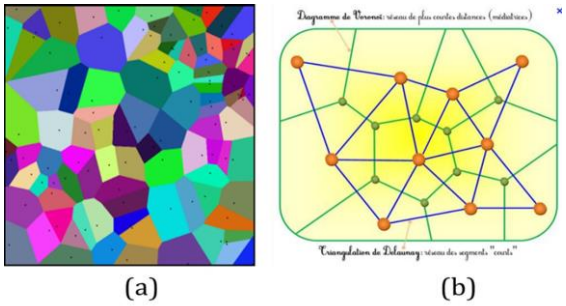

Figure 2 – (a) Polyèdre de Voronoï (cellules construites dans un domaine en 2D, (b) Triangulation de Delaunay.

2.3. Fonction Level-Set

La méthode « Level-Set » ou surfaces de niveau est une technique numérique d'analyse de surfaces et de formes. Elle permet par exemple d'étudier le mouvement d'un objet en contact avec un objet déformable. Si l'objet déformable est une courbe, l'idée consiste à considérer que cette courbe est la section d'un objet volumique fixe par un plan mobile, donc une courbe de niveau. Dans le cas de cette méthode que nous avons choisie de développer, l'approche est sensiblement différente. La fonction Level-Set qui est le scalaire à transporter, est définie comme une fonction continue correspondant à la distance à l'interface des grains.

La fonction Level-Set Φ est définie dans un domaine de calcul Ω de telle sorte que la courbe de niveau zéro ($\Phi = 0$) définisse l'interface Γ d'une surface fermée S. De manière arbitraire, on choisit la fonction Φ de telle sorte qu'elle soit positive à l'intérieur de cette surface et négative à l'extérieur. Pour décrire le mouvement de la fonction Level-Set dans le domaine Ω, on part du principe qu'une particule fictive se trouvant initialement sur l'interface, doit toujours y rester. Soit $\Phi(x, y, t)$ la fonction Level-Set, dont les propriétés sont les suivantes :

- $\Phi(x, y, t)>0$ si s est à l'intérieur de la courbe
- $\Phi(x, y, t)<0$ si s est à l'extérieur de la courbe
- $\Phi(x, y, t)=0$ si s est sur la courbe.

La courbe est définie telle que : $\Gamma=(x, y) \ / \ \Phi(x, y, t)=0\}$. A l'aide de la fonction Level-Set, les joints de grains et les grains sont répartis selon la fraction volumique choisie et différentes propriétés ont pu été définies pour chacun d'entre eux.

3. Simulations numériques

3.1. Géométrie et conditions

Pour les simulations, nous avons configuré deux modèles de poly-cristal appliqués au cuivre à l'aide du diagramme de Voronoï et de la fonction Level-Set (Fig.3). Les modèles comportent chacun 10 grains et chaque grain est entouré par un domaine de joints de grains. Les deux modèles se différencient par la taille des grains qui les composent donc par la fraction volumique des joints de grains. Cela permettra d'assurer l'évolution de la fraction volumique des joints en fonction de la taille des grains conformément à la littérature [9]. Nous avons imposé un déplacement de 20% de la longueur totale sur ces modèles sous l'hypothèse de déformation plane avec une vitesse de $0.01s^{-1}$. Cette hypothèse permet de maintenir la stabilité du VER aux cours des calculs. Les paramètres utilisés décrivant chaque grain et le joint de grains qui l'entoure se différencient par la valeur de la cission critique. Les valeurs des angles d'orientation sont générées aléatoirement et la

cission critique des grains est deux fois plus importante que celle des joints de grains [10]. Pour le cuivre avec une taille de grains de 50 nm (dont la fraction volumique des joints est de 6%), la cission critique est de 242MPa pour les grains et 121MPa pour les joints de grains [10]. Dans le cas du cuivre constitué de grains de taille de 20 nm (dont la fraction volumique des joints est de 14%), cette valeur passe à 603MPa pour les grains et 301MPa pour les joints de grains.

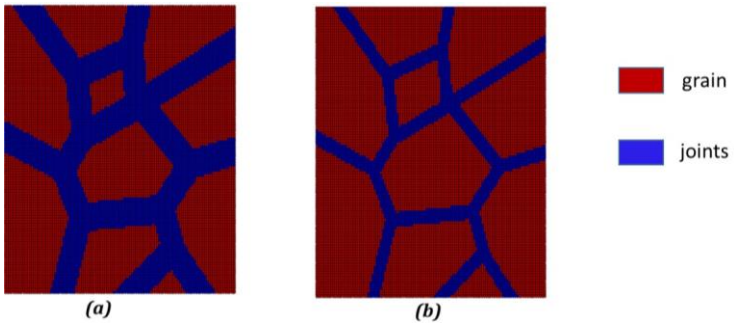

Figure 3 - Configuration de deux modèles de poly-cristal constitués respectivement de grains de taille égale à (a) 20 nm (la fraction volumique des joints de grains est alors égale à 14%) et (b) 50 nm (la fraction volumique des joints de grains est alors de 6%).

3.2. Résultats et discussion

Lors des calculs, en fonction des zones définies par fonctions Level-Set, une valeur de la cission critique est attribuée à chaque zone selon son appartenance aux domaines des grains ou des joints de grains. Ceci permet d'éviter la partition des joints de grains pour les modèles éléments finis. Selon les résultats de la simulation (Fig. 4 et Fig. 5), nous pouvons remarquer une concentration de contrainte et de déformation plastique au niveau des joints de grains puis une propagation de la déformation à l'intérieur des grains. Ce phénomène est cohérent avec le fait que les joints de grains subissent des déformations importantes à l'échelle nanométrique. Les courbes contrainte-déformation pour ces modèles sont présentées sur la Fig. 6. On peut voir qu'une diminution de la taille des grains entraîne une augmentation du niveau de contrainte observé. Les simulations révèlent aussi que plus la fraction volumique de joints de grains est significative, plus la déformation supportée par le VER est importante. D'un point de vue qualitatif, il est possible de constater que les courbes représentées sur les Fig. 6 et Fig. 7 ont des allures similaires. On peut remarquer que sur chacune de ces courbes, le passage du domaine élastique au domaine inélastique est progressif. Le niveau de contrainte atteint augmente avec la diminution de la taille de grains, ce qui est cohérent avec la littérature [11]. On peut également observer une différence au niveau de l'écrouissage pour ces deux configurations. Pour le cas d'un matériau constitué de grains de taille 50 nm, le plateau tout au long de la partie inélastique indique qu'il n'y a pas d'écrouissage. En revanche, pour le cas de grains de taille 20 nm, un phénomène d'adoucissement apparaît.

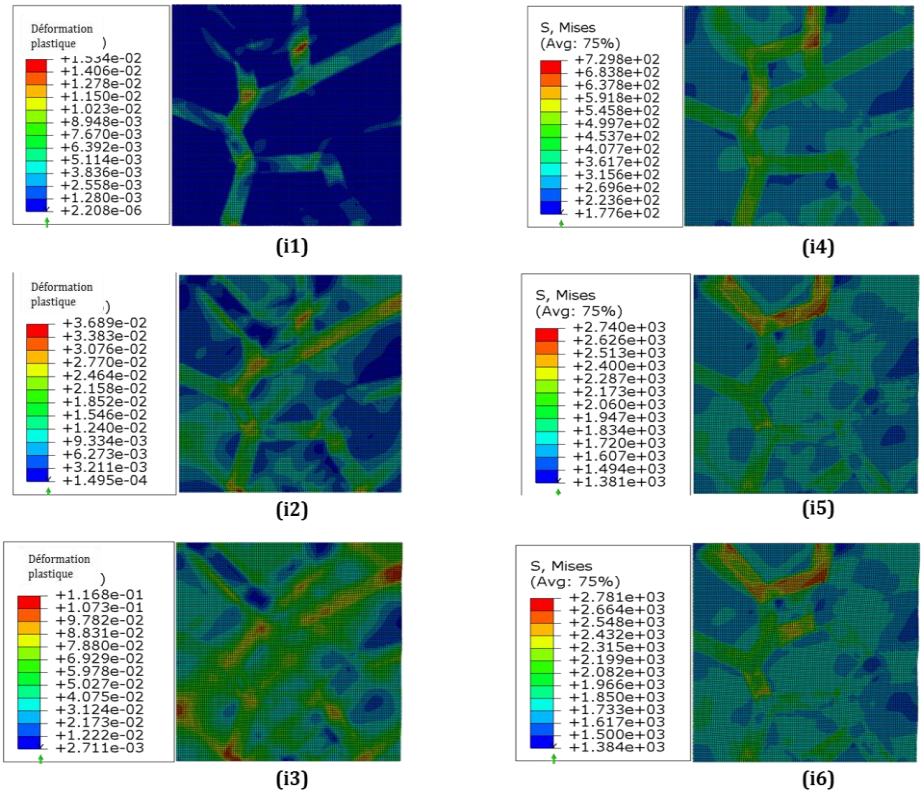

Figure 4 – Evolution de la déformation plastique et de la contrainte de Von Mises pour le modèle d'un matériau de cuivre constitué de grains de taille 20 nm.

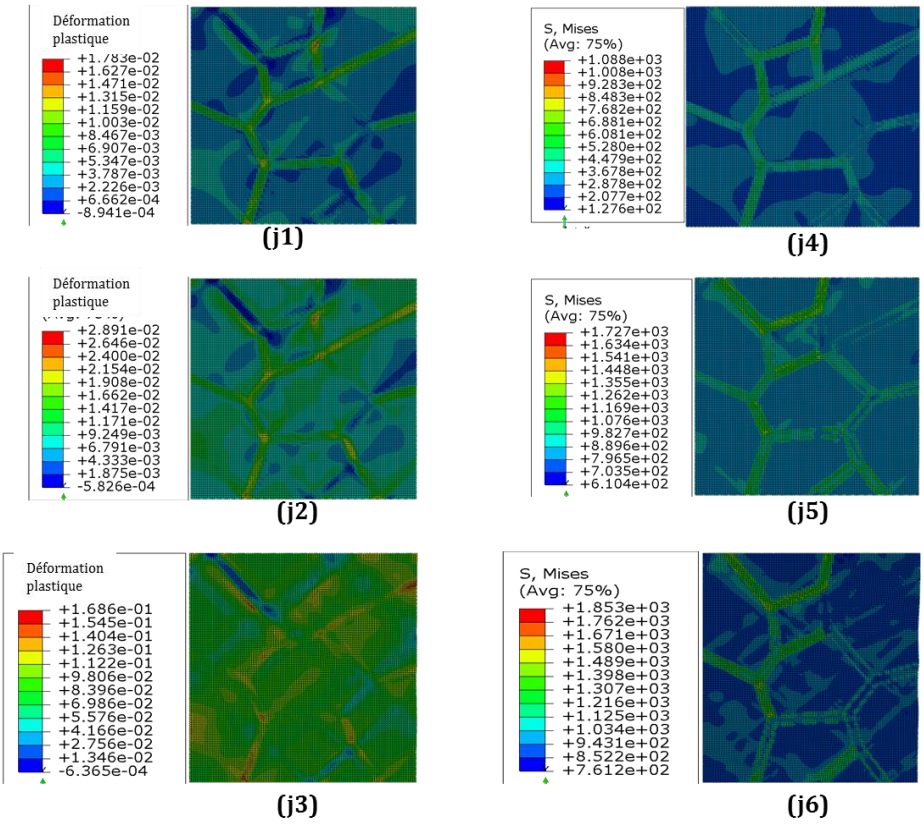

Figure 5 – Evolution de la déformation plastique et de la contrainte de Von Mises pour le modèle d'un matériau de cuivre constitué de grains de taille 50 nm.

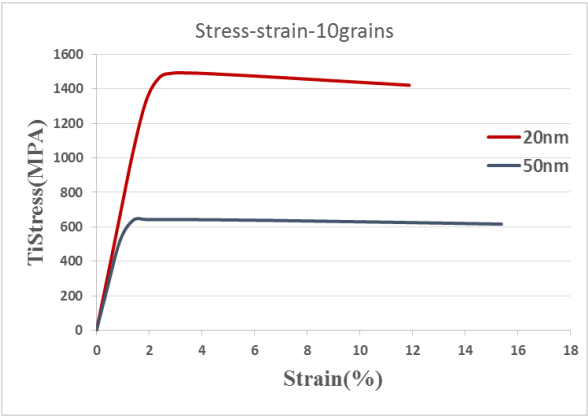

Figure 6 – Courbes contrainte-déformation pour les deux modèles étudiés avec des tailles de grains de 20 nm et de 50 nm, respectivement.

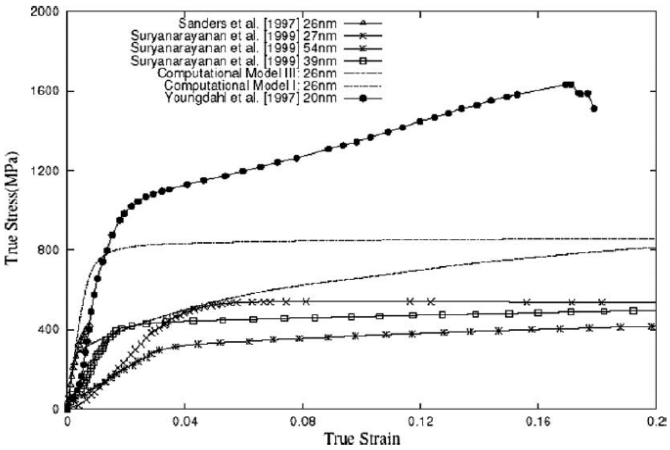

Figure 7 – Courbes expérimentales de la littérature pour différentes tailles de grains de cuivre [10].

4. Conclusions et perspectives

Ce travail a porté sur la modélisation de la déformation de matériaux nanocristallins en cuivre pur en utilisant un couplage entre la plasticité cristalline et la méthode Level-Set. Des simulations numériques ont été effectuées pour deux modèles de taille de grains de 20 nm et 50 nm, respectivement. Les courbes contrainte-déformation obtenues sont cohérentes avec les courbes disponibles dans la littérature d'un point de vue qualitatif. Il est remarqué que le niveau de contrainte augmente avec la diminution de la taille de grains.

Les simulations avaient pour but de modéliser par éléments finis la déformation de matériaux nanocristallins. Au cours de ces simulations, plusieurs problèmes ont été rencontrés. Ces problèmes sont essentiellement liés à la zone de transition entre les grains et les joints de grains. Lorsque le maillage est grossier, la description de la transition n'est pas précise, ce qui provoque souvent des problèmes de convergence. Cependant, si un maillage fin est appliqué sur tout le domaine, le temps de calcul est augmenté de façon conséquente. Nous proposons quelques perspectives pour la suite de ce travail :

- Utiliser une technique de maillage local qui permettrait de mieux gérer la transition entre les grains et les joints de grains.

- Automatiser la génération de fonctions Level-Set pour que le modèle puisse être étendu en 3D.

5. Référence

[1] H. Gleiter, Nanocrystalline materials, Prog. Mater. Sci., page223-page315, 1989.

[2] P. G. Sanders, J. A. Eastman, J. R. Weertman. Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium. .Acta mater. Vol. 45, page4019-page4025, 1997.

[3] K. Lu, Nanocrystalline metals crystallized from amorphous solids: nanocrystallization,

structure and properties, Mater Sci Eng, page161-page221, 1996

[4] Z. Fan, Y. Wu, X. Zhao, Y. Lu, Simulation of polycrystalline structure with Voronoi diagram in

Laguerre geometry based on random closed packing of spheres, Computational Materials Science, page301-page308, 2004.

[5] S. Osher, and J.A. Sethian, Fronts Propagating with Curvature Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations, J. Comput. Phys. page12-page49, 1988.

[6] L. Méric, G. Cailletaud, M. Gaspérini. FE calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests, Acta Metall Mater, vol. 42, page921–page935, 1994.

[7] A. Musienko, Plasticité cristalline en présence de grande déformation et d'endommagement, Mechanics [physics.med-ph], Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2005.

[8] L. Guibas, Randomized incremental construction of Delaunay and Voronoi diagrams, Algorithmica, vol. 7, page381-page413, 1992.

[9] G. Palumbo, S.J. Thorpe and K.T. Aust, On the contribution of triple junctions to the structure and properties of nanocrystalline materials, Scripta Metal. Mater, Vol.24, page1347-page1350, 1990.

[10] M.A. Meyers, A. Mishra, D.J. Benson, Mechanical properties of nanocrystalline materials, Prog. Mater. Sci., page427–page556, 2006.

[11] E.O.Hall, The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results, Proc. Phys. Soc, Vol.64, page747–page753, 1951.