

Analyse statistique par calculs EF de la transition d'échelle dans les polycristaux hexagonaux

M. PRISER^{a,b}, P. PILVIN^b, J.-M. CLOUE^a et S. PASCAL^c

a. AREVA/AREVA NP, 10 rue Juliette Récamier 69456 LYON

b. UEB/LIMATB, Rue de Saint-Maudé 56321 LORIENT

c. DEN/DM2S/SEMT/LM2S, CEA Saclay, 91191 GIF-SUR-YVETTE

Résumé :

Dans la démarche auto-cohérente classique où chaque phase est en interaction directe avec le milieu homogène équivalent, de nombreuses règles de transition d'échelle ont été proposées. L'absence de solutions exactes pour un comportement élastoviscoplastique pose la question de leur validité, surtout si l'anisotropie est marquée. Nous proposons une démarche statistique, fondée sur des calculs EF d'agrégats, permettant de construire une solution numérique de «référence» des champs moyens dans différentes phases. Ces résultats sont finalement confrontés à différentes règles de transition.

Abstract :

In the self consistent approach where each phase is directly interacting with the homogeneous equivalent medium, many scale transition rules have been proposed. The lack of analytical solutions for elastoviscoplastic medium ask the question of their validity especially when anisotropy is marked. Based on FE computations of aggregates, a statistical approach is proposed in order to build a «refering» numerical solution of mean fields in different phases. These results are finally compared with different transition scale rules.

Mots clefs : Homogénéisation, Transition d'échelle, polycristaux hexagonaux

1 Introduction

Les alliages de zirconium possèdent peu de systèmes de glissement permettant d'accommoder la déformation plastique suivant l'axe c et présentent donc une forte anisotropie de comportement. Cette anisotropie s'exprime à l'échelle macroscopique par le biais de la texture cristallographique spécifique aux produits laminés. La question que l'on se pose est la suivante : quel est l'impact de l'anisotropie sur la localisation des champs dans un polycristal ? Afin d'apporter des éléments de réponse à cette interrogation, nous mettons en œuvre des calculs EF d'agrégats polycristallins. De nombreux auteurs ont développé cette technique par le passé dans divers contextes [BDJC01, DLRC05]. Il semble que cette technique de calcul soit devenue mature pour permettre de conduire des «expérimentations numériques» et d'en déduire une estimation fiable des champs locaux.

2 Description des calculs EF d'agrégats

Les calculs d'agrégats ont été conduits avec le logiciel Abaqus. Les maillages élaborés sont constitués de plusieurs centaines de milliers d'éléments tétraédriques à interpolation linéaire. Les calculs entrepris sont donc coûteux en temps mais les durées restent acceptables.

2.1 Elaboration des microstructures

Les maillages, générés sous CAST3M (<http://www-cast3m.cea.fr>), sont construits sur une mosaïque de Voronoï en considérant N germes distribués aléatoirement dans un cube unitaire. Le processus de

génération des microstructures est finalement très proche d'un processus de solidification à germes aléatoires. Si les germes sont distribués suivant un processus poissonnien en respectant une distance de répulsion isotrope entre les germes alors il conduit nécessairement à une microstructure équiaxe.

2.2 Texture cristallographique

La texture cristallographique constitue une donnée essentielle pour comprendre le comportement d'un polycristal. C'est cette caractéristique des polycristaux qui conduit à une anisotropie de comportement macroscopique. Nous souhaitons connaître le nombre de réalisations nécessaires pour être représentatif de la texture cristallographique d'un Milieu Homogène Equivalent (MHE). Une approche spécifique a été développée dans cette étude pour introduire dans les agrégats une distribution des orientations qui respecte la texture cristallographique visée.

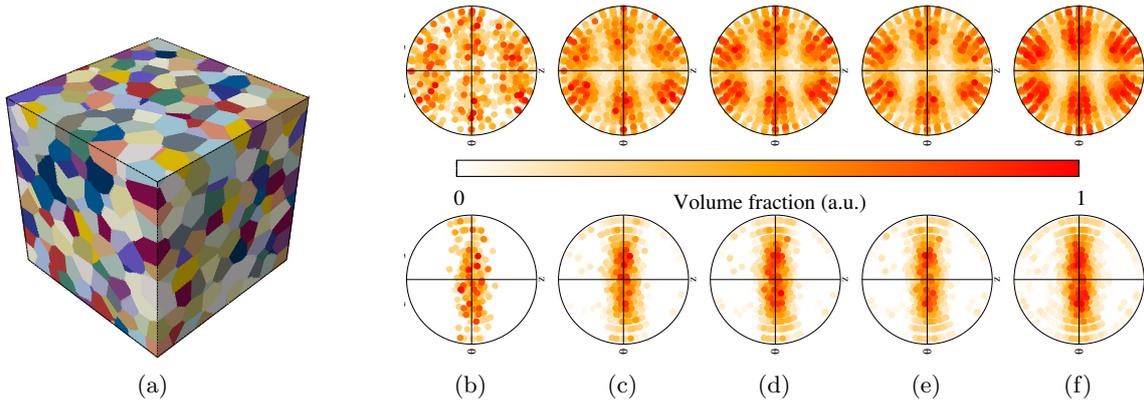


FIG. 1 – (a) Visualisation d'un agrégat contenant 1000 grains et évolution de la texture cristallographique équivalente avec le nombre de réalisations [(b) 1, (c) 10, (d) 30 et (e) 50 réalisations] comparée à (f) la texture cible (alliage Zy-4 recristallisé) [en haut : figure de pôles prismatique ; en bas : figure de pôles basale].

Considérons N grains dans un agrégat polycristallin, l'objectif est de fixer l'orientation de chaque grain tout en respectant la distribution statistique que l'on souhaite reproduire dans nos calculs : typiquement, une texture isotrope ou bien une texture anisotrope caractéristique des alliages de zirconium. Pour une texture isotrope, il suffit de tirer aléatoirement N orientations dans un ensemble isotrope. En revanche, pour une texture anisotrope, les orientations sont tirées aléatoirement dans un ensemble anisotrope pondéré par les fractions volumiques des orientations obtenues par une analyse DRX du produit que l'on souhaite reproduire. Comme on peut le visualiser sur les figures de pôles basal et prismatique (Fig. 1), trente réalisations semblent suffisantes pour avoir une bonne représentativité statistique d'une texture. Les figures de pôles représentées ici correspondent au tracé des textures équivalentes des agrégats.

2.3 Loi de comportement

Dans tous les calculs, on considère l'élasticité isotrope ($E = 80\text{GPa}$ et $\nu = 0.37$). De plus, on suppose le comportement viscoplastique contrôlé par le glissement prismatique. La cission résolue τ^s est obtenue en projetant le tenseur des contraintes sur s grâce au tenseur d'orientation $\underline{\underline{\mu}}^s$ du système s défini par la relation 3. Dans ce modèle de viscoplasticité cristalline, la loi de Schmid est utilisée pour décrire l'activation du glissement. Dès que la cission τ^s devient plus grande que la cission critique τ_0 , le glissement est activé et suit une loi issue de la théorie des processus thermiquement activés. Le taux de glissement sur le système s , $\dot{\gamma}^s$, est alors donné par la relation 1.

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}^0 \sinh\left(\frac{\tau_v^s V}{k_B T}\right) \frac{\tau_v^s}{|\tau_v^s|} \quad \text{avec :} \quad \tau_v^s = |\tau^s| - \tau_\mu^s \quad (1)$$

L'augmentation des densités de dislocations est à l'origine d'un écrouissage intragranulaire du matériau.

Ce durcissement est modélisé par l'augmentation de la cission critique au cours de l'écoulement viscoplastique. Dans l'équation (1), τ_v^s est la contribution visqueuse de la cission appliquée. L'écrouissage est régi par l'évolution de la densité de dislocations selon la loi d'Orowan. Dans ce modèle de comportement, l'auto-écrouissage et l'écrouissage latent sont pris en compte et leur contribution relative est gérée par le paramètre η (considéré indépendant de s). Enfin, l'évolution de la densité de dislocations est gérée par un bilan entre production et annihilation des dislocations.

$$\tau_\mu^s = \tau_0 + \alpha\mu b \sqrt{\eta \sum_{u \in S} \rho^u + (1 - \eta)\rho^s} \quad \text{et} \quad \dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(\frac{\sqrt{\sum \rho^s}}{K} - 2y\rho^s \right) \quad (2)$$

Paramètre	Symbole	Unité	Valeur
Norme du vecteur de Burgers	b	nm	0.343
Volume d'activation	V	b^3	70
Terme pré-exponentiel	$\dot{\gamma}^0$	s^{-1}	1.10^{-9}
Cission critique	τ_0	MPa	20
Force d'obstacle	α	-	0.14
Libre parcours moyen des dislocations	K	-	1.8
Distance d'annihilation	y	b	4
Paramètre d'écrouissage latent	η	-	0.1

TAB. 1 – Paramètres matériau utilisés pour décrire le comportement EVP des grains.

Finalement, le tenseur des vitesses de déformation $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}$ s'obtient en sommant l'ensemble des contributions des systèmes de glissement *via* la relation 3.

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} = \sum_{s \in S} \dot{\gamma}^s \underline{\underline{\mu}}^s \quad \text{avec :} \quad \underline{\underline{\mu}}^s = \frac{1}{2} (\underline{n}^s \otimes \underline{m}^s + \underline{m}^s \otimes \underline{n}^s) \quad (3)$$

où \underline{n}^s et \underline{m}^s sont la normale au plan de glissement et la direction de glissement du système s .

3 Estimation statistique de la réponse d'une phase

Dans l'approche auto-cohérente classique, la notion de grains est remplacée par le concept de phase cristalline qui regroupe l'ensemble des grains de même orientation cristallographique. Une phase est donc caractérisée par son orientation cristallographique et sa forme (qui correspond à la forme moyenne des grains appartenant à la phase). Dans le cas de alliages recristallisés, la géométrie de chaque phase est décrite par une sphère. En considérant que chaque phase est plongée dans le MHE, le comportement macroscopique du polycristal est obtenu en moyennant l'ensemble des comportements locaux sur la texture cristallographique.

3.1 Estimation EF de la réponse d'une phase

Dans nos calculs d'agrégats, le grain central, noté GC, va jouer un rôle particulier. Comme il s'agit du grain le plus éloigné du bord, il est le moins sensible aux conditions aux limites. L'objectif est de construire un estimateur statistique de la réponse mécanique moyenne d'une phase, φ , d'orientation cristallographique donnée.

Tout d'abord, on fixe l'orientation cristallographique du GC correspondant à la phase φ dont on souhaite estimer la réponse moyenne. Ensuite, on tire les orientations des autres grains suivant une distribution donnée. Enfin, on impose aux bords du cube unitaire une sollicitation macroscopique. Au cours de cette "expérimentation numérique", on estime la moyenne des champs mécaniques (contrainte et déformation) dans le GC.

Les champs mécaniques ainsi obtenus sont ceux d'un grain de forme polyédrique (forme de la cellule de Voronoï associé au GC) plongé dans un environnement qui ne possède pas encore les propriétés du MHE à cause du faible nombre de grains en interaction avec lui. L'idée consiste à itérer ce processus suffisamment de fois pour converger vers la solution souhaitée. Au cours de la seconde itération, on maintient l'orientation du GC, on modifie la géométrie de l'agrégat, et donc la forme du GC, et on réalise une nouvelle distribution des orientations des autres grains. On obtient alors une deuxième réalisation de la réponse moyenne de φ .

Après N simulations, on calcule la moyenne d'ensemble des réalisations des champs mécaniques moyens et de leurs fluctuations dans le grain central. La réponse moyenne d'une phase φ est, par définition, la réponse moyenne d'un ensemble de grains de même orientation ayant des formes et des voisinages différents, ce qui correspond exactement à l'estimateur que nous proposons. Un schéma de principe de cet estimateur statistique de la réponse moyenne d'une phase φ est donné figure 2.

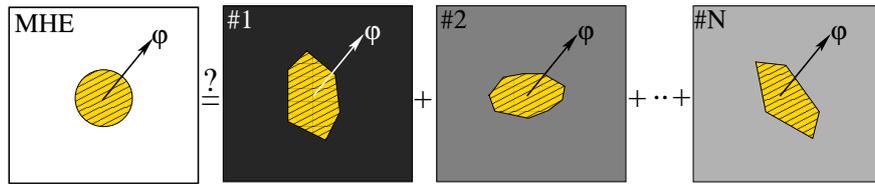


FIG. 2 – Schéma de principe de l'estimateur statistique $p(\varphi)$ de la réponse mécanique d'une phase φ plongée dans un MHE.

En considérant N réalisations et M_r points d'intégration dans le grain central de la réalisation r , la réponse d'une phase cristallographique φ est caractérisée par les champs moyens $\underline{\underline{\sigma}}^\varphi$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}^\varphi$. L'estimation EF de la réponse moyenne d'une phase φ , $p(\varphi)$, est obtenue en combinant moyenne d'espace et d'ensemble au travers de la relation 4.

$$p(\varphi) = \left\{ \underline{\underline{x}}^\varphi = \left\langle \left\langle \underline{\underline{x}} \right\rangle_{GC_r} \right\rangle_{r \in R} = \frac{1}{N} \sum_{r=1}^N \sum_{j=1}^{M_r} \frac{V_j}{V_r} \underline{\underline{x}}_j^r \right\} \quad \text{avec :} \quad x = \sigma \text{ ou } \varepsilon \quad (4)$$

où V_j et V_r sont les volumes associés au point d'intégration j et au grain central de la réalisation r . Les quantités $\underline{\underline{x}}_j^r$ correspondent aux valeurs des champs mécaniques pour la réalisation r au point d'intégration j .

3.2 Validité de l'estimation en élasticité cubique

L'objectif est de montrer que l'estimation EF proposée permet de retrouver la solution dans le cas d'un comportement élastique anisotrope où l'on sait que l'estimation auto-cohérente fournit une très bonne solution du problème. On considère le problème d'une inclusion sphérique avec un comportement élastique anisotrope (élasticité cubique) plongée dans un milieu homogène, infini et isotrope qui correspond au comportement effectif du polycristal isotrope associé. On applique une déformation homogène à l'infini et on veut connaître l'état de contrainte dans l'inclusion. La relation de localisation entre la contrainte au sein de l'inclusion et la contrainte imposée est classique, on peut la retrouver dans l'ouvrage [BBG01].

On représente, sur les figures 3(a) et 3(b), les courbes de convergence et de vitesse de convergence de l'estimation du comportement obtenue à l'aide de $p(\varphi)$ pour un essai de traction isochore pour les composantes σ_{11} , σ_{33} et σ_{12} du tenseur des contraintes. Les calculs étant rapides comparés aux calculs réalisés en non linéaire, environ 1000 réalisations ont été calculées. Comme on peut le constater, l'estimation EF permet de retrouver la solution théorique de l'inclusion élastique anisotrope plongée dans un MHE isotrope avec des vitesses de convergence proche d'une loi en racine carrée témoignant de l'indépendance statistique des réalisations.

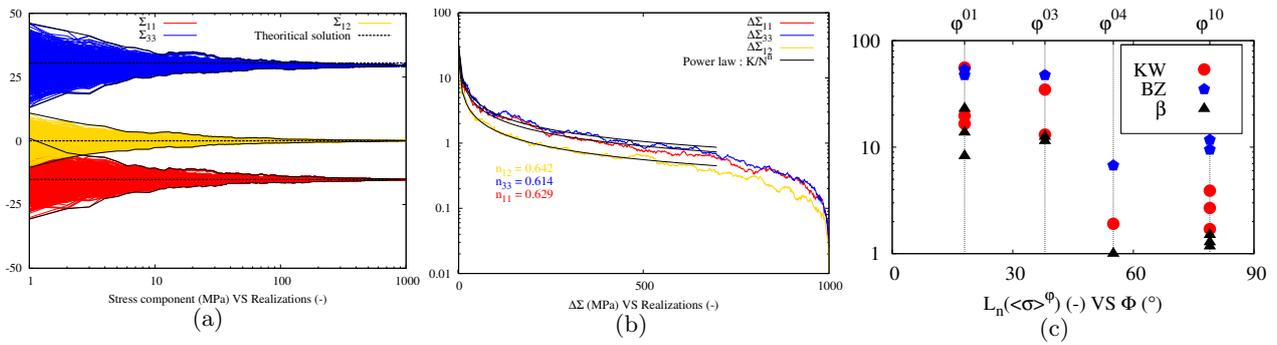


FIG. 3 – (a) Convergence et (b) vitesse de convergence de l'estimateur $p(\varphi)$ et (c) mise évidence de l'apport de la règle en β par rapport aux modèles KW et BZ.

3.3 Orientations cristallographiques des phases étudiées

Un des objectifs des calculs EF est de construire une base de données de référence du comportement EVP d'un certain nombre de phases cristallographiques. Les orientations de ces phases ne sont pas choisies au hasard. On souhaite construire une base représentative de l'ensemble des comportements que l'on peut trouver au sein d'un polycristal, c'est-à-dire des comportements fortement non linéaires jusqu'aux comportements quasi-élastiques. Dans le cas des comportements non linéaires, la plasticité est activée de façon précoce, principalement sous l'effet de l'orientation favorable des systèmes de glissement par rapport à la sollicitation. Dans le cas des comportements quasi-élastiques, les systèmes de glissement s'activent peu. On choisit d'analyser dans cette étude la réponse de quatre phases correspondant à quatre angles Φ très différents : $\Phi = 18^\circ$ (φ^{01}), 38° (φ^{03}), 55° (φ^{04}) et 79° (φ^{10}). L'angle Φ correspond à l'angle entre la direction de traction \vec{t} et la direction \vec{c}_φ attachée à l'axe c de la phase φ .

3.4 Confrontation modèles / Estimation EF

Dans cette partie, nous souhaitons confronter la réponse moyenne des quatre phases cristallographiques obtenue par EF aux prédictions des modèles de Kröner-Weng (KW) [Kro61], de Berveiller-Zaoui (BZ) [BZ79] et de Pilvin-Cailletaud (règle en β) [CP94]. Nous représentons, sur la figure 4(a), toutes les composantes du tenseur contrainte en fonction de la déformation macroscopique.

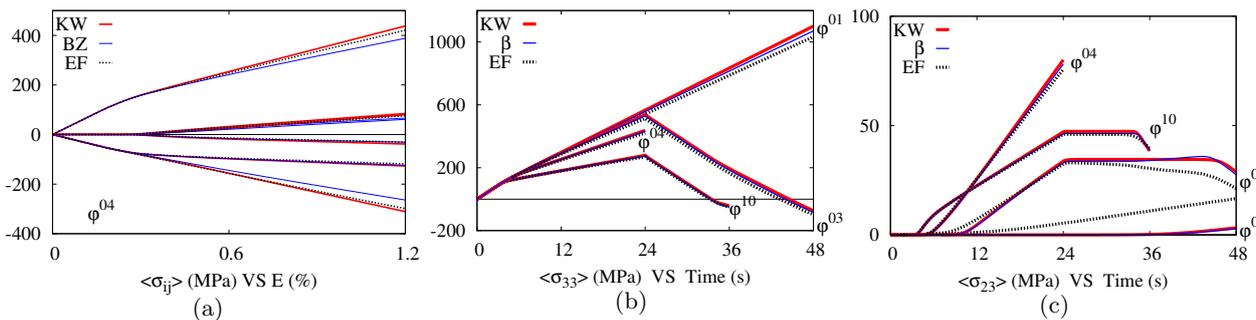


FIG. 4 – (a) Comparaison entre les modèles KW et BZ et l'estimation EF de la réponse moyenne de la phase φ^{04} pour un agrégat sollicité en traction isochore et évolution de deux composantes ((b) σ_{33} et (c) σ_{23}) du tenseur des contraintes pour différentes phases cristallographiques pour un essai de traction isochore.

Nous pouvons constater sur ces figures que les premiers stades de l'écoulement viscoplastique des phases sont parfaitement décrits par le modèle de Kröner et *a fortiori* par le modèle BZ. Ce constat provient du fait que dans les premiers instants de l'écoulement plastique des phases, la matrice accommode les incompatibilités de déformation élastiquement ce qui constitue l'hypothèse de base du

modèle de Kröner. En revanche, lorsque le niveau de déformation augmente, on voit apparaître des écarts entre l'estimation EF et le modèle BZ. Dans la plupart des cas, le modèle BZ prévoit une réponse mécanique trop souple par rapport à la référence EF alors qu'au contraire le modèle KW prédit une réponse trop raide du comportement des phases.

On remarque en outre que les modèles de transition d'échelles BZ et KW éprouvent plus de difficultés à reproduire les résultats EF pour les phases "raides" ayant un axe c proche de l'axe de traction que pour les phases plus "souples" comme la phase φ^{10} par exemple. Ceci provient du fait que les phases "raides" activent peu de plasticité puisqu'elles sont défavorablement orientées pour le glissement prismatique. Ces phases ne peuvent donc pas accommoder les incompatibilités de déformation. Or, celles-ci plastifient tout de même et ce malgré leur orientation défavorable pour le glissement prismatique. Nous pensons que c'est la plasticité de milieu environnant qui doit permettre de surcontraindre les phases raides et d'apporter un niveau de contrainte suffisant près des joints de grain pour provoquer l'écoulement viscoplastique de ces phases.

Contrairement aux modèles KW et BZ, des paramètres ajustables (D et δ) sont introduits dans la règle en β pour donner au modèle une certaine flexibilité. L'autocohérence de cette règle doit donc être justifiée *a posteriori* en démontrant une bonne description des champs moyens. Dans cette règle, la contrainte moyenne dans une phase φ est donnée à partir des relations 5.

$$\underline{\underline{\sigma}}_{\varphi} = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta) \left(\sum_{\varphi \in G} f_{\varphi} \underline{\underline{\beta}}_{\varphi} - \underline{\underline{\beta}}_{\varphi} \right) \quad \text{avec :} \quad \underline{\underline{\dot{\beta}}}_{\varphi} = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{\varphi}^p - D(\underline{\underline{\beta}}_{\varphi} - \delta \underline{\underline{\varepsilon}}_{\varphi}^p) \|\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}_{\varphi}^p\| \quad (5)$$

où f_{φ} est la fraction volumique de la phase φ et G l'ensemble des phases du polycristal.

L'identification des paramètres ajustables D et δ de la règle en β est réalisée grâce au logiciel SiDoLo et conduit à une estimation des paramètres ajustables : $D = 139$ et $\delta = 0.785$. Afin de mesurer l'apport du modèle en β par rapport aux modèles KW et BZ, on trace la valeur des différentes fonctions coûts en fonction de l'angle Φ . Comme on peut le constater sur la figure 3(c), la règle en β améliore nettement la description de la réponse mécanique des phases par rapport aux deux modèles puisque l'ensemble des essais présente un écart "modèle/expérience EF" plus faible par rapport à ces modèles. On retrouve de manière plus systématique le fait que la réponse des phases raides est moins bien décrite que la réponse des phases à forte activité plastique.

Références

- [BBG01] M. Bornert, T. Bretheau, and P. Gilormini. *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 : matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermès, 2001.
- [BDJC01] F. Barbe, L. Decker, D. Jeulin, and G. Cailletaud. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 1 : F.E. model. *International Journal of Plasticity*, 17 :513–536, 2001.
- [BZ79] M. Berveiller and A. Zaoui. An extension of the self-consistent scheme to plastically-fowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 26 :325–344, 1979.
- [CP94] G. Cailletaud and P. Pilvin. Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis. *Revue Européenne des Eléments Finis*, 3 :515–541, 1994.
- [DLRC05] O. Diard, S. Leclercq, G. Rousselier, and G. Cailletaud. Evaluation of finite element based analysis of 3d multicrystalline aggregates plasticity : Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries. *International Journal of Plasticity*, 21 :691–722, 2005.
- [Kro61] E. Kroner. Zur plastischen verformung des vielkristalls (Déformation plastique des polycristaux). *Acta Metallurgica*, 9 :155, 1961.