

Distribution et transport des variables de modèles polycristallins pour la prédiction de l'anisotropie mécanique des métaux en mise en forme

Marianne Béringhier

▶ **To cite this version:**

Marianne Béringhier. Distribution et transport des variables de modèles polycristallins pour la prédiction de l'anisotropie mécanique des métaux en mise en forme. Sciences de l'ingénieur [physics]. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2006. Français. NNT : . pastel-00002020

HAL Id: pastel-00002020
https://pastel.hal.science/pastel-00002020

Submitted on 11 Jan 2007

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.

ECOLE DES MINES
DE PARIS

Ecole Doctorale 364 : Sciences Fondamentales et Appliquées

N° attribué par la bibliothèque

|__|__|__|__|__|__|__|__|__|__|

T H E S E

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Ecole des Mines de Paris
Spécialité «Mécanique Numérique»

présentée et soutenue publiquement par

Marianne Béringhier

Soutenue le 18 octobre 2006

DISTRIBUTION ET TRANSPORT DES VARIABLES DE MODELES POLYCRISTALLINS POUR LA PREDICTION DE L'ANISOTROPIE MECANIQUE DES METAUX EN MISE EN FORME

Directeurs de thèse : Yvan Chastel et Roland Logé

Jury :

M. Esteban Busso	Président
Mme Colette Rey et M. Javier Signorelli	Rapporteur
Mme Andréa Tommasi	Rapporteur
M. Yvan Chastel	Examinateur
M. Roland Logé	Examinateur

Membres invités :

M. Vincent Barranx, M. Laurent Delannay, M. Patrice Lasne

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier la Direction de l'Ecole des Mines de Paris pour m'avoir donné la possibilité d'effectuer ce travail de thèse au Centre de Mise en Forme des Matériaux de Sophia-Antipolis. Merci tout particulièrement à Jean-Loup Chenot, directeur du CEMEF.

J'ai eu la chance de réaliser cette étude sous la direction de Yvan Chastel et Roland Logé. Leurs compétences et leurs qualités humaines ont été une source de motivation permanente pour moi. J'ai beaucoup appris durant ces années de thèse.

Merci à Andrea Tommasi, Colette Rey et Javier Signorelli d'avoir accepté de rapporter ma thèse ainsi qu'à Esteban Busso pour avoir présidé le jury de thèse.

Je tiens aussi à remercier Patrice Lasne et Richard Ducloux qui, grâce à leurs idées, m'ont permis de réaliser ce travail de thèse. Je remercie également Laurent Delannay pour sa collaboration et ses idées tout au long de ma thèse.

Cette thèse s'est déroulée dans le cadre du projet SIMULFORGE. Je tiens à exprimer ma gratitude à tous les acteurs de ce consortium, et particulièrement à Christian Dumont animateur du Groupe d'Etudes 1 Métallurgie de la déformation. Je remercie également Vincent Barranx du groupe Cézus pour sa présence à ma soutenance. Je remercie également Dédé et Arnaud d'Aubert et Duval Pamiers pour les essais de l'URB66 ainsi que Richard de Manoirs Industries pour les essais de l'AA7175. Merci également à Isabelle Poitraut pour m'avoir fait visiter le site d'Industeel du Creusot.

Je remercie vivement Gilbert Fiorucci, Suzanne Jacomet, Michel-Yves Perrin et Monique Repoux qui m'ont transmis leur passion pour l'expérimental et qui m'ont permis d'apprendre à observer les métaux. Vraiment un grand merci.

Je tiens également à remercier les personnes du GEM de l'Ecole Centrale de Nantes qui m'ont accueilli lors de ma 4ème année de thèse en qualité d'ATER. Merci à Patrice Cartraud, Irina Ionescu et Nicolas Moës avec qui j'ai exercé la recherche et aux professeurs avec lesquels j'ai exercé mes activités d'enseignement.

Je remercie aussi le groupe Métal du laboratoire GEMPPM à l'INSA Lyon et particulièrement Catherine Verdu qui m'ont accueilli depuis septembre pour un post-doc. Merci pour leur soutien au cours du dernier mois avant la soutenance.

Pour terminer, je remercie vivement le personnel du CEMEF que je n'ose de citer de peur d'oublier des noms, mes collègues de bureau, les thèsards du CEMEF, les permanents du CEMEF qui m'ont soutenu et aidé pendant ces années de thèse.

Quant à ma famille et à mes amis, ils (elles) se reconnaîtront et ne douteront pas de ma reconnaissance et de mon affection.

Table des matières

I Introduction ……... 2
I.1 Contexte ..……...…… 3
I.2 Objectifs ……..……... 3
I.3 Plan de l'étude ……... 4
Références bibliographiques ……... 5

II Prise en compte de l'anisotropie mécanique dans la modélisation des procédés de mise en forme …… 6
II.1 Modèles basés sur des descriptions d'anisotropie macroscopiques ……. 7
II.1.1 Généralités …..…….……... 7
II.1.2 Exemples ……...…….….. 8
II.1.3 Couplage à la méthode EF ……..…….…… 9
II.2 Modèles macroscopiques basés sur la théorie de la plasticité cristalline …..……... 9
II.2.1 Lois de comportement dérivées de la plasticité cristalline …….. 9
II.2.2 Modèles avec surfaces d'écoulement analytiques ……... 10
II.2.2.1 Prise en compte de l'effet de la texture …….. 10
II.2.2.2 Prise en compte de l'effet de l'écrouissage …… 12
II.2.3 Couplage à la méthode EF ……... 13
II.3 Modèles polycristallins …….. 14
II.3.1 Principes de l'homogénéisation ……... 14
II.3.2 Vers la modélisation du comportement mécanique des polycristaux ……. 15
II.3.2.1 Généralités …….. 15
II.3.2.2 Lois constitutives du grain …….. 16
II.3.3 Changement d'échelle …… …….……... 18
II.3.3.1 Modèles de type Taylor …….. 18
II.3.3.2 Modèles auto-cohérents ..…… 20
II.3.3.3 Méthode des Eléments Finis appliquée à un polycristal …… 23
II.3.3.4 Transformée de Fourier Rapide …….. 24
II.3.4 Couplage des modèles polycristallins à la méthode EF …….. 24
II.4 Microstructure Sensitive Design ……..…… 25
Conclusion …….. 25
Références bibliographiques ……... 27

III La méthode des particules Lagrangiennes appliquée au suivi des données microstructurales …… 32
III.1 La méthode des particules Lagrangiennes : présentation bibliographique et historique 33
III.1.1 La méthode P.I.C. (Particle In Cell) ……..……. 33
III.1.2 Les modèles particulaires : applications multiples …..…….. 33
III.2 Nouvelle application de la méthode des particules Lagrangiennes : suivi de l'évolution de données microstructurales ……... 34
III.2.1 Problématique et stratégie proposée …….. 34
III.2.2 Principe général de la méthode basée sur le concept des particules Lagrangiennes ……... 34
III.2.2.1 Les particules Lagrangiennes dans le maillage EF ……... 34
III.2.2.2 Notion de cellule de particule …… 34

III.2.2.3 Distribution des données microstructurales : notion de microstructures partielles …… 36
III.2.2.4 Suivi de l'évolution des données microstructurales …….. 36
III.2.3 Discussion concernant la distribution de la microstructure représentative …… 36
III.2.3.1 Distribution dans les cellules ……..… 37
III.2.3.2 Distribution sur les points d'intégration …… 38
III.2.4 Intérêt de la méthode des particules Lagrangiennes …….. 39
III.2.4.1 Réduction du temps de calcul des simulations …….. 39
III.2.4.2 Compatibilité avec le remaillage ……... 39
III.2.4.3 Possibilité d'intégrer des microstructures représentatives différentes 40
III.3 Vers l'application de la méthode aux cas des modèles polycristallins : plan de l'étude 40
Références bibliographiques…….….. 41

IV Implémentation du couplage Forge3® / rhéologie anisotrope pour la simulation des procédés de mise en forme sans remaillage …….. 44
IV.1 Implémentation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin ……. 45
IV.1.1 Présentation du code EF Forge3® ……. 45
IV.1.1.1 Formulation faible et discrétisation EF ……. 45
IV.1.1.2 Formulation grande déformation …….. 49
IV.1.2 Le modèle d'évolution microstructurale utilisé …… 50
IV.1.2.1 Formalisme mathématique pour la description de la déformation élasto-viscoplastique d'un cristal …… 50
IV.1.2.2. Paramètres à identifier dans le modèle …… 53
IV.1.3 Les différentes stratégies de couplage méthode EF/ modèle polycristallin …... 55
IV.1.3.1 Principe général du couplage …… 55
IV.1.3.2 Stratégies de couplage …….. 56
IV.1.4 Les équations de l'interface méthode EF / Modèle polycristallin élasto-viscoplastique ……..…….. 57
IV.1.4.1 Stratégie de couplage fort ……. 57
IV.1.4.2 Stratégie de couplage faible ……. 58
IV.2 Validation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin élasto-viscoplastique dans le cas où une particule Lagrangienne est positionnée au centre de gravité de chaque EF …….. 59
IV.2.1 Validation de la stratégie de couplage fort …… 59
IV.2.1.1 Présentation des simulations ……. 59
IV.2.1.2 Résultats en terme de prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture …….. 61
IV.2.1.3 Conclusion …… 63
IV.2.1.4 Etude complémentaire : Temps de calcul des simulations en fonction du nombre d'EFs dans le maillage et du nombre d'orientations cristallographiques……... 63
IV.2.2 Validation de la stratégie de couplage faible ……. 65
IV.2.2.1 Présentation des simulations ……. 65
IV.2.2.2 Résultats des simulations …….. 66
IV.2.2.2.1 Temps de calcul des simulations ……. 66
IV.2.2.2.2 Prédiction d'anisotropie et évolution de texture ……. … 66
IV.2.2.3. Conclusion ……... 71
Conclusion …….. 71
Références bibliographiques …….. 71

V Méthode de réduction du temps de calcul à l'aide du concept des particules Lagrangiennes …….. 74
V.1 Les méthodes de réduction du temps de calcul existantes ……... 76
V.1.1 Réduction du nombre d'appels au modèle polycristallin …… 76
V.1.2 Réduction du nombre d'orientations cristallographiques nécessaires pour présenter la texture du matériau …… 76

V.1.2.1 Les méthodes de discrétisation de texture à partir de la FDO ……..…. 77
V.1.2.2 Application originale de la méthode de la composante de texture ……. 77
V.2 Une nouvelle méthode de réduction du temps de calcul : la distribution spatiale des orientations dans le maillage EF …… 79
V.2.1 Principe général ……... 79
V.2.2 La méthode de distribution constante ……. 80
V.2.3 La méthode de distribution selon le volume ……... 80
V.3 Etude des deux méthodes de distribution des orientations sur les EFs et choix d'une méthode ……... 81
V.3.1 Présentation des simulations ……... 81
V.3.2 Résultats des simulations …… 82
V.3.2.1 Validation de l'implémentation des deux méthodes de distribution ….. 82
V.3.2.2 Evolution de texture et prédiction d'anisotropie selon les différents nombres de textures distribuées et la méthode de distribution utilisée ……... 83
V.3.2.3 Temps de calcul des simulations …… 85
V.3.3 Discussion préliminaire ……... 85
V.3.4 Influence du maillage EF …… 89
V.3.5 Discussion ……... 90
V.4 Application de la méthode de distribution selon le volume dans un cas de déformation hétérogène avec une seule particule …… 91
V.4.1 Compression de cylindre avec frottement …….. 91
V.4.1.1 Présentation des simulations …….. 91
V.4.1.2 Résultats des simulations …… 92
V.4.1.2.1 Prédiction de l'anisotropie mécanique …….. 92
V.4.1.2.2 Prédiction de l'évolution de texture cristallographique …… 93
V.4.1.3 Temps de calcul des simulations …… 95
V.4.1.4 Conclusion ……. 95
V.4.2 Application de la méthode de distribution selon le volume à un procédé de mise en forme : l'emboutissage de coupes cylindriques. Etude menée par L. Delannay ……... 97
V.4.2.1 Simulation préliminaire : test de traction uniaxiale …… 97
V.4.2.2 Simulation EF de l'emboutissage ……... 98
V.4.2.3 Résultats des simulations d'emboutissage ……. 100
V.4.2.4 Discussion ……. 102
V.5 Application de la méthode de distribution dans un cas de déformation hétérogène avec plusieurs particules Lagrangiennes …… 102
V.5.1 Méthode de distribution des orientations avec plusieurs particules ……... 102
V.5.1.1 Principe général des deux méthodes de distribution des orientations sur les particules …….. 103
V.5.1.1.1 La méthode de distribution selon le volume …….. 103
V.5.1.1.2 La méthode de distribution semi-constante ……... 103
V.5.1.2 Comparaison des deux méthodes de distribution des orientations sur les particules …… 103
V.5.2 Comparaison d'un cas avec une seule particule et plusieurs particules pour le couplage fort et le couplage faible …… 106
V.5.2.1 Présentation des simulations …….. 106
V.5.2.2 Résultats …….…… 106
V.5.2.2.1 Prédiction d'anisotropie mécanique …….. 106
V.5.2.2.2 Temps de calcul des simulations ……... 108
V.5.2.3 Discussion …….. 108
Conclusion …….. 109
Références bibliographiques …….. 110

VI Les particules Lagrangiennes et le transport des variables de modèles polycristallins lors du remaillage …… 112
VI.1 Remaillage et transport des variables dans Forge3® ……..…… 113
VI.1.1 Le transport P1 ……... 113
VI.1.2 Le transport P0 ……... 114
VI.2 Le transport des variables de modèles polycristallins lors du remaillage …….. 115
VI.2.1 Position du problème ……..…… 115
VI.2.2 Les différentes stratégies de transport des variables de modèles polycristallins 115
VI.2.2.1 Première stratégie : calcul polycristallin uniquement sur les particules 116
VI.2.2.1.1 Principe général …… 116
VI.2.2.1.2 Présentation des simulations …… 117
VI.2.2.1.3 Résultats ……... 118
VI.2.2.1.4 Discussion concernant la première stratégie …… 118
VI.2.2.2 Deuxième stratégie : calcul polycristallin sur les EFs …….. 119
VI.2.2.2.1 Principe général des deux méthodes …… 119
VI.2.2.2.2 Intérêt des deux méthodes …… 122
VI.3 Comparaison des méthodes 2A et 2B ……. 122
IV.3.1 Présentation des simulations …….. 123
VI.3.2 Résultats en terme de prédiction d'anisotropie et d'évolution de texture …….. 123
VI.3.2.1 Influence du nombre de particules dans le maillage EF ……... 124
VI.3.2.1.1 Une seule particule positionnée dans le maillage EF ……... 124
VI.3.2.1.2 Différents nombres de particules dans le maillage EF ……. 130
VI.3.2.2 Influence du nombre de remaillages …… 135
VI.3.3 Temps de calcul des simulations ……... 140
VI.3.4 Discussion et choix de la méthode de transport des variables de modèles polycristallins lors du remaillage …….. 140
VI.4 Compléments concernant l'étude de la méthode 2B …….. 141
VI.4.1 Sensibilité à la taille de maille ……... 141
VI.4.2 Sensibilité au couplage rhéologique utilisé ……... 143
Conclusion ……. 146
Références bibliographiques …….. 146

VII Etude expérimentale ……. 148
VII.1 Caractérisation de la microstructure des matériaux d'étude ……. 149
VII.1.1 Les techniques expérimentales ……. 149
VII.1.1.1 La microscopie optique et l'analyse d'images ……. 149
VII.1.1.2 La technique EBSD ……. 150
VII.1.1.3 La technique EDS …… 150
VII.1.1.4 La microdureté Vickers ……... 150
VII.1.2 Caractérisation microstructurales des différents matériaux …….. 150
VII.1.2.1 L'URB66 corroyé …… 151
VII.1.2.2 L'URB66 brut de solidification ……... 151
VII.1.2.3 L'AA7175 filé ……. 156
VII.2 Essais mécaniques ……. 157
VII.2.1 Présentation des essais …….. 157
VII.2.1.1 L'URB66 corroyé …… 157
VII.2.1.2 L'URB66 brut de solidification ……... 159
VII.2.1.3 L'AA7175 filé ……. 166
VII.2.2 Analyse de l'anisotropie mécanique et de l'évolution de texture après déformation …….. 167
VII.2.2.1 L'URB66 corroyé …… 167
VII.2.2.2 L'URB66 brut de solidification ……... 168
VII.2.2.3 L'AA7175 filé ……. 171

Conclusion …….. 174
Références bibliographiques …….. 175

VIII Validation des implémentations numériques par comparaison avec l'expérience …... 176
VIII.1 Calibrage des paramètres des paramètres du modèle polycristallin et de la loi de frottement ……..... 177
VIII.1.1 Paramètres du modèle polycristallin ……... 177
VIII.1.2 Coefficients de la loi de frottement ……. 178
VIII.2 Validation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin et méthode de distribution des orientations : cas de compression uniaxiale de l'URB66 brut de solidification ……... 179
VIII.2.1 Présentation des simulations ……..….. 179
VIII.2.1.1 Paramètres du modèle polycristallin …….. 179
VIII.2.1.2 Coefficients de la loi de frottement …… 180
VIII.2.1.3 Conditions opératoires des simulations ……. 180
VIII.2.1.4 Géométrie et maillage des lopins ……... 181
VIII.2.1.5 Mise en place de la méthode de distribution des orientations …… 181
VIII.2.2 Résultats des simultations ……... 181
VIII.2.2.1 Détermination des coefficients de frottement …… 181
VIII.2.2.2 Prédiction de l'anisotropie mécanique ……... 182
VIII.2.3 Temps de calcul des simulations …… 183
VIII.2.4 Discussion …….. 184
VIII.3 Validation du transport des variables polycristallines lors du remaillage : écrasement sur génératrice de l'AA7175 filé ……. 185
VIII.3.1 Présentation des simulations ……..…. 185
VIII.3.2 Résultats des simulations en terme de prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture cristallographique ……. 187
VIII.3.2.1 Eprouvette lubrifiée ……..…... 187
VIII.3.2.2 Eprouvette non lubrifiée …… 193
VIII.3.3 Temps de calcul des simulations …… 194
VIII.3.4 Conclusion …….. 194
Conclusion …….. 194
Références bibliographiques ……... 195

IX Conclusion et perpectives …….. 196

Chapitre I

Introduction

Sommaire

I.1 Contexte ……. ……..……. 3
I.2 Objectifs …….. 3
I.3 Plan de l'étude …… 4
Références bibliographiques …….. 4

I.1 Contexte

Pour l'industrie métallurgique, la maîtrise des caractéristiques mécaniques et géométriques des pièces réalisées, qui dépendent des procédés de mise en forme et des propriétés des matériaux utilisés, a une influence capitale sur la qualité de la production. Devant la complexité croissante des problèmes posés par les contraintes technologiques, le recours aux expériences et au calcul analytique est maintenant en grande partie supplanté par des simulations numériques qui, grâce à la puissance des ordinateurs, permettent l'utilisation de modèles physiques plus réalistes et des calculs plus précis.

Pour les métaux, le recours à des procédés de mise en forme tels que le forgeage, après une première étape de solidification, est fréquent. La structure brute de solidification est donc souvent la première structure à travailler. Selon le procédé de solidification utilisé, cette structure peut présenter des caractéristiques microstructurales (grains colonnaires par exemple) qui lui confèrent, lors du forgeage à chaud, un comportement mécanique anisotrope.

De manière générale, l'anisotropie mécanique apparaissant lors du forgeage à chaud peut être liée d'une part aux paramètres procédés et d'autre part aux caractéristiques microstructurales du matériau. Dans notre étude, nous nous focalisons sur l'anisotropie induite par la microstructure, qui dépend principalement des textures morphologique, topologique et cristallographique du matériau, elles-mêmes pouvant être induites par des procédés amont. Nous avons plus précisément choisi de nous limiter à l'étude de l'anisotropie induite par la texture cristallographique.

Ce travail a été mené dans le cadre du projet français « Simulforge ». L'industrie de la forge souhaite disposer d'un modèle de comportement intégré dans le code éléments finis (EF) Forge3® qui permette de prédire l'anisotropie induite par la microstructure. Les matériaux industriels ciblés par cette étude sont de deux sortes :

- les structures brutes de solidification,
- les structures forgées présentant un écoulement anisotrope dû à la texture cristallographique du métal.

Les matériaux d'étude retenus sont l'URB66 brut de solidification (acier super-austénitique), l'URB66 corroyé pour les structures forgées et l'alliage d'aluminium 7175 filé.

I.2 Objectifs

La rhéologie et donc la déformation du matériau dépendent fortement de la microstructure (textures morphologique et cristallographique) et induisent en retour une évolution des propriétés microstructurales en grandes déformations [CHE 1997]. D'un point de vue numérique, la résolution de problèmes mécaniques et métallurgiques en forgeage à chaud requiert donc un couplage des propriétés de la microstructure aux conditions aux limites du volume étudié [CHA 1991], [CHE 1996]. Ce couplage permet de calculer le comportement mécanique et l'évolution de la microstructure.

Afin de prédire l'évolution de la texture cristallographique et l'anisotropie induite au cours de la simulation de procédés de mise en forme, nous avons choisi un modèle de comportement fondé sur la plasticité cristalline. Le formalisme consiste à effectuer un passage du comportement des éléments microstructuraux représentatifs (grain, …) à celui moyenné ou homogénéisé utilisable comme loi générale macroscopique dans Forge3®. Ce type d'approche a déjà été validé dans le cadre de procédés de mise en forme stationnaires avec le code EF Lam3 [LOG 1999], et instationnaires avec Forge3® [KNO 2001].

Utiliser comme modèle de comportement un modèle polycristallin engendre, lors des simulations de procédés de mise en forme, des temps de calcul très élevés. En effet, le couplage classique modèle polycristallin/méthode EF consiste à considérer une texture représentative du matériau à chaque point d'intégration du maillage EF. La texture représentative du matériau est généralement constituée d'un ensemble de 1000 orientations cristallographiques environ. Le nombre d'opérations de calcul augmentant sensiblement avec le nombre d'orientations dans le volume étudié,

le temps de calcul devient prohibitif pour une discrétisation spatiale précise. Nous avons donc mis en place une méthode qui permet de réduire le temps de calcul de ces simulations.

De plus, au cours de certains procédés de mise en forme tels que le forgeage, le matériau subit de grandes déformations plastiques. La simulation numérique de ce type de procédés a notamment pour objectif de décrire les transformations géométriques subies par le matériau. Pour une formulation Lagrangienne, cas du logiciel Forge3®, le maillage est attaché à la matière et se déforme donc tout au long du chemin de déformation de la même façon que la matière. C'est pourquoi ce type de formulation entraîne généralement une dégénérescence du maillage, imposant ainsi le recours au remaillage. Un générateur automatique de maillage est présent dans le code Forge3®. Lors du remaillage, afin de continuer le calcul, il est nécessaire de « transporter » les variables d'état depuis l'ancien vers le nouveau maillage. Une méthode de transport existe dans le code EF Forge3® pour différents types de variables. Mais elle n'est pas applicable au transport des variables polycristallines représentant la texture cristallographique du matériau. Nous avons donc développé une méthode de transport des variables polycristallines lors du remaillage, notamment compatible avec la méthode de réduction du temps de calcul.

Nous avons regroupé les solutions aux deux problématiques précédentes au sein d'un formalisme unifié, basé sur une nouvelle utilisation du concept des particules Lagrangiennes. Nous proposons ainsi une méthode globale qui peut être appliquée de façon plus générale au suivi et au transport de variables microstructurales.

Notre travail comporte également une partie expérimentale ayant pour principal objectif de comprendre les facteurs influençant l'anisotropie mécanique dans le cas d'une structure brute de solidification, et de valider les différents développements numériques réalisés dans le code EF Forge3®.

I.3 Plan de l'étude

Pour répondre à ces différentes problématiques, nous avons organisé notre travail en 3 parties.

La **première partie** regroupe les chapitres II et III. Nous y justifions le choix de l'utilisation d'un modèle polycristallin et introduisons notre méthode basée sur le concept des particules Lagrangiennes.

Au chapitre II, nous examinons les différents modèles existant dans la littérature permettant de prendre en compte l'anisotropie mécanique lors des simulations des procédés de mise en forme et nous discutons des avantages et inconvénients de ces différents modèles au vu de leur intégration dans un code EF. Cette discussion nous amène au choix d'un modèle polycristallin, qui permet de prendre en compte l'anisotropie et de suivre son évolution, ainsi que celle de la texture cristallographique.

Au chapitre III, nous présentons notre utilisation originale du concept des particules Lagrangiennes, qui répond aux problèmes de la réduction du temps de calcul des simulations et du transport des variables microstructurales lors du remaillage.

La **deuxième partie** de ce travail recouvre les chapitres IV, V et VI. Nous y exposons en détail la mise en place de la méthode des particules Lagrangiennes et présentons les différents développements réalisés dans le code EF Forge3®.

Au chapitre IV, nous présentons le code EF Forge3® ainsi que le modèle de comportement microstructural choisi. Nous discutons des différentes stratégies de couplage possibles entre la méthode EF et le modèle de comportement. Pour ces différentes stratégies de couplage, nous intégrons la méthode classique qui consiste à considérer une microstructure représentative à chaque point d'intégration du maillage EF. Les équations du couplage méthode EF / modèle de comportement microstructural sont présentées ainsi que la validation numérique de cette première implémentation. Nous verrons que le temps de calcul des simulations est très élevé.

Au chapitre V, après avoir passé en revue les différentes stratégies existantes pour réduire le temps de calcul des simulations EFs couplées à des modèles de comportement microstructural, nous proposons une nouvelle méthode. Elle consiste à distribuer une microstructure représentative du matériau sur plusieurs points d'intégration. La prise en compte de textures partielles au niveau des points d'intégration du maillage EF sera discutée. La stratégie sera validée et discutée dans le cas de simulations sans remaillage, avec une particule ou plusieurs particules positionnées dans le maillage EF.

Au chapitre VI, nous exposons dans un premier temps la méthode de transport existante des variables dans Forge3® lors du remaillage. Celle-ci dépend de la nature des variables à transporter et nous montrons qu'une nouvelle stratégie de transport s'impose pour le transport des variables de microstructure. Ensuite, nous proposons différentes stratégies de transport et les discutons afin de dégager celle que nous allons finalement utiliser.

La **troisième partie** de ce travail (chapitres VII et VIII) présente la validation des développements numériques vis-à-vis de l'expérience.

Au chapitre VII, nous présentons le travail expérimental réalisé dans le cadre de la thèse. Il s'agit principalement de mesures de texture cristallographique et d'essais mécaniques sur les trois matériaux de l'étude qui sont : l'URB66 corroyé, l'URB66 brut de solidification et l'alliage d'aluminium 7175 filé. Ces matériaux sont tous les trois de structure cristalline CFC.
L'URB66 corroyé présente une texture cristallographique aléatoire alors que l'URB66 brut de solidification présente, dans la zone colonnaire, une texture cristallographique orientée et dans la zone équiaxe, une texture cristallographique aléatoire. La texture cristallographique inhérente à ces deux matériaux va induire, lors de la compression, une anisotropie spécifique. Sur ces deux types de matériaux, les essais mécaniques sont des essais de compression suivis d'une trempe afin de figer la microstructure. L'URB66 brut de solidification a fait l'objet d'une étude plus poussée afin de voir quels sont les différents paramètres microstructuraux inhérents à ce type de structure qui peuvent influencer l'anisotropie lors des procédés de mise en forme.
La texture initiale de l'AA7175 filé est une texture orientée. L'essai mécanique réalisé sur ce matériau est un écrasement sur génératrice d'une barre. Le remaillage est nécessaire lors de la simulation de ce type d'essai mécanique.

Au chapitre VIII, nous présentons la validation des développements numériques vis-à-vis de l'expérience.

Enfin, au chapitre IX, nous présentons les conclusions et les perspectives de ce travail.

Références bibliographiques

[CHA 1991] Y. Chastel, P.R. Dawson and U.K. Kocks, Comparison of polycrystalline rolling simulations with experiments, Modeling Deformation of Crystalline Solids, TMS, pp. 225-238, 1991.

[CHE 1996] J.L. Chenot and Y. Chastel, Mechanical, thermal and physical coupling methods in FE analysis of metal forming processes, Journal of Materials Processing Technology 60, pp. 11-18, 1996.

[CHE 1997] J.L. Chenot, Y. Chastel and J.W. Signorelli, Modelling metal forming processes using polycrystalline plasticity, Proceedings of Thermec'97, Sidney, pp. 2101-2107, 1997.

[KNO 2001] R. Knockaert, Numerical and experimental study of the strain localization during sheet forming processes, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - CEMEF, 2001.

[LOG 1999] R. Logé, Influence des conditions thermomécaniques et de la microstructure sur les évolutions de texture cristallographique du Zircaloy-4 en mise en forme à chaud, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - CEMEF, 1999.

Chapitre II

Prise en compte de l'anisotropie mécanique dans la modélisation des procédés de mise en forme

Sommaire

II.1 Modèles basés sur des descriptions d'anisotropie macroscopiques 7
II.1.1 Généralités 7
II.1.2 Exemples 8
II.1.3 Couplage à la méthode EF 9
II.2 Modèles macroscopiques basés sur la théorie de la plasticité cristalline 9
II.2.1 Lois de comportement dérivées de la plasticité cristalline 9
II.2.2 Modèles avec surfaces d'écoulement analytiques 10
II.2.2.1 Prise en compte de l'effet de la texture 10
II.2.2.2 Prise en compte de l'effet de l'écrouissage 12
II.2.3 Couplage à la méthode EF 13
II.3 Modèles polycristallins 14
II.3.1 Principes de l'homogénéisation 14
II.3.2 Vers la modélisation du comportement mécanique des polycristaux 15
II.3.2.1 Généralités 15
II.3.2.2 Lois constitutives du grain 16
II.3.3 Changement d'échelle 18
II.3.3.1 Modèles de type Taylor 18
II.3.3.2 Modèles auto-cohérents 20
II.3.3.3 Méthode des Eléments Finis appliquée à un polycristal 23
II.3.3.4 Transformée de Fourier Rapide 24
II.3.4 Couplage des modèles polycristallins à la méthode EF 24
II.4 Microstructure Sensitive Design 25
Conclusion 25
Références bibliographiques 27

Une propriété d'un matériau est dite « anisotrope » si elle dépend de la direction dans laquelle elle est mesurée. Dans le contexte de la simulation de procédés de mise en forme, il est nécessaire de prendre en compte des modèles de comportement permettant de prédire l'anisotropie mécanique. Plusieurs modèles de ce type sont apparus à partir des années 1930. Ce chapitre présente une revue de ces différents modèles, qui peuvent être classés en deux grandes catégories : les modèles basés sur des descriptions de l'anisotropie macroscopiques et les modèles basés sur la théorie de la plasticité cristalline.

Nous présentons différents modèles existants et discutons des avantages et inconvénients du couplage de ces modèles à la méthode EF pour la prédiction de l'anisotropie et de l'évolution de la texture cristallographique lors de simulations de procédés de mise en forme. Nous tenons à préciser que de tels modèles sont nombreux, et que nous n'avons donc pas l'ambition d'en fournir une liste exhaustive. Nous avons sélectionné certains d'entre eux afin de donner un aperçu représentatif des différents modèles disponibles dans la littérature.

II.1 Modèles basés sur des descriptions d'anisotropie macroscopiques [DAW 2004]

II.1.1 Généralités

A l'échelle continue, les critères d'anisotropie sont définis mathématiquement par des surfaces d'écoulement ou des potentiels. Ces critères sont des extensions des critères de Tresca [TRE 1864] et Von Mises [VON 1913] définis pour les matériaux isotropes. Pour les matériaux incompressibles, un critère d'écoulement est une surface convexe dans l'espace des contraintes déviatoriques :

$$f(\sigma') = 0 \qquad \text{(II.1)}$$

où σ est la contrainte de Cauchy et le prime indique sa partie déviatorique.
Pour les matériaux non sensibles à la vitesse de déformation,
- { σ' tel que $f(\sigma') = 0$ } représente le domaine plastique,
- { σ' tel que $f(\sigma') < 0$ } représente le domaine élastique,
- { σ' tel que $f(\sigma') > 0$ } représente un domaine physiquement inacceptable.

La sensibilité à la vitesse de déformation implique l'existence de familles de surfaces paramétrisées par une variable, comme par exemple le paramètre de Zener-Hollomon Z qui est défini par $Z=\dot{\bar{\varepsilon}}\exp(\beta/T)$ [KOC 1998] où β est un paramètre matériau lié à l'énergie d'activation des phénomènes microstructuraux, T la température et $\dot{\bar{\varepsilon}}$ la vitesse de déformation généralisée :

$$f(\sigma', Z) = 0 \qquad \text{(II.2).}$$

Avec cette représentation du comportement inélastique, l'écoulement plastique se produit à tous les niveaux de contrainte, mais, du fait de la dépendance hautement non linéaire de la surface par rapport au paramètre vitesse de déformation, la vitesse de déformation plastique diminue très rapidement lorsque la contrainte passe en dessous d'un certain seuil.

La vitesse de déformation plastique peut être déduite du critère d'écoulement si ce critère est décrit par une fonction potentiel. Dans ce cas, la vitesse de déformation plastique s'écrit sous la forme:

$$D'^{p} = \frac{\partial f}{\partial \sigma'} \qquad \text{(II.3)}$$

où la fonction *f* est proportionnelle à la puissance du travail plastique.

De plus, f est un potentiel dual [HIL 1987], [VAN 1989] tel que :

$$\sigma' = \frac{\partial f}{\partial D'^{p}} \qquad \text{(II.4).}$$

La relation entre le tenseur vitesse de déformation et le tenseur de contrainte est un élément essentiel des modèles de l'écoulement plastique. La description du comportement mécanique dépend de cette relation, par exemple le coefficient de Lankford *r*. Le coefficient de Lankford est classiquement introduit comme étant une mesure du rapport de la déformation plastique latérale sur la déformation plastique en épaisseur d'une éprouvette plate en traction uniaxiale. La formabilité d'un matériau dépend mécaniquement de la stabilité de la déformation homogène, qui est directement liée à la loi d'écoulement. Quantifier correctement la relation entre la contrainte appliquée et la vitesse de déformation plastique résultante est la première raison pour laquelle les modèles d'anisotropie ont été construits.

L'anisotropie implique que la surface d'écoulement donnée par f n'est pas seulement une fonction des invariants de la contrainte. Les paramètres dans les critères sont liés à une base de coordonnées attachée au matériau. Les difficultés récurrentes rencontrées lors des descriptions de l'anisotropie sont :

- obtenir en même temps une courbure et une taille correctes pour f dans l'espace des contraintes,
- évaluer les différents paramètres de l'expression de f par des tests mécaniques,
- étendre les critères pour inclure des lois d'écrouissage.

II.1.2 Exemples

Le premier critère d'anisotropie plastique a été proposé par Hill en 1948 [HIL 1948]. Il est basé sur les hypothèses suivantes :

- il existe 3 plans de symétrie orthogonaux, les directions normales à ces plans sont appelées les axes principaux d'anisotropie,
- l'effet Bauschinger est ignoré,
- la pression hydrostatique n'a pas d'influence sur le comportement du matériau.

Ce critère d'écoulement est une expression quadratique à 6 paramètres, qui est une extension du critère de Von Mises [VON 1913] :

$$F(\sigma_{22}-\sigma_{33})^2 + G(\sigma_{33}-\sigma_{11})^2 + H(\sigma_{11}-\sigma_{22})^2 + 2L\sigma_{23}^2 + 2M\sigma_{13}^2 + 2N\sigma_{12}^2 = 1 \qquad \text{(II.5).}$$

La forme de la surface d'écoulement dans l'espace des contraintes est déterminée par les 6 coefficients *F*, …, *N*. En théorie, ces coefficients peuvent être déterminés à l'aide d'essais de traction dans les trois directions (*F, G, H*) et d'essais de cisaillement (*L, M, N*). Dans le cas des tôles métalliques, trois tests de traction à 0°, 45° et 90° par rapport à la direction de laminage sont suffisants. Ce modèle a notamment été utilisé par Knockaert [KNO 2001] pour la simulation des procédés d'emboutissage car il permet de prendre en compte en entrée les valeurs du coefficient de Lankford et la contrainte d'écoulement. Ce modèle, intégré dans un grand nombre de codes EF, est largement utilisé même s'il ne s'applique théoriquement qu'aux matériaux orthotropes.

Hill propose en 1979 [HIL 1979] une autre classe de surfaces d'écoulement décrites par l'équation II.6 où σ est la contrainte équivalente. L'idée est de construire un modèle phénoménologique en accord avec les surfaces d'écoulement calculées par les modèles de plasticité polycristalline (cf. II.3).

$$F\left|\sigma_{22}-\sigma_{33}\right|^m + G\left|\sigma_{33}-\sigma_{11}\right|^m + H\left|\sigma_{11}-\sigma_{22}\right|^m = \sigma^m \qquad \text{(II.6).}$$

L'exposant *m* permet de contrôler la forme de la surface d'écoulement. Selon [HOS 1979] et [LIA 1991], $m \approx 6$ et $m \approx 8$ donnent de bonnes approximations pour les matériaux BCC et CFC respectivement. Le critère de Hill (éq. II.6) est valable lorsque le matériau est orthotrope et la charge coaxiale à un axe de symétrie.

Les critères de Hill étant restreints à des matériaux orthotropes, d'autres critères non quadratiques ont été proposés afin de pallier cette limitation. Barlat et Lian [BAR 1989] ont ainsi proposé une autre expression de la surface d'écoulement, inspirée du critère d'isotropie de degré *M* de Hosford [HOS 1972]. Leur travail se restreint aux états de contraintes planes mais peut être étendu aux cas anisotropes. L'expression de la surface d'écoulement est :

$$a\left|K_1 + K_2\right|^M + a\left|K_1 - K_2\right|^M + c\left|2K_2\right|^M = 2\sigma^M \qquad \text{(II.7)}$$

avec

$$K1 = \frac{\sigma_{xx} + h\sigma_{yy}}{2} \qquad K_2 = \sqrt{\left(\frac{\sigma_{xx} - h\sigma_{yy}}{2}\right)^2 + p\sigma_{xy}^2}$$

a, *c*, *h* et *p* sont des constantes matériau. Les auteurs les ont ajustées à la surface d'écoulement plane calculée avec le modèle de Taylor-Bishop et Hill [BIS 1951] et ils ont montré que la surface d'écoulement était correctement reproduite lorsque la texture n'était pas trop marquée. Barlat a élaboré depuis plusieurs autres modèles sur ces bases [BAR 2005].

II.1.3 Couplage à la méthode EF

Les surfaces d'écoulement phénoménologiques décrites par les critères anisotropes macroscopiques ont un grand nombre d'avantages. Tout d'abord, leur implémentation numérique dans un code EF est simple en comparaison des autres modèles présentés en II.2 et II.3. De plus, ils permettent de décrire l'anisotropie globale et non pas celle uniquement liée à la texture cristallographique.

Ces modèles présentent néanmoins différents inconvénients non négligeables. Les paramètres relatifs à ces critères ne sont pas toujours faciles à déterminer à l'aide d'expériences. De plus, la dépendance de la forme de la surface d'écoulement en fonction de la déformation est difficile à obtenir et il n'y a pas de description naturelle de l'évolution de l'anisotropie en grande déformation.

II.2 Modèles macroscopiques basés sur la théorie de la plasticité cristalline

Ces modèles prennent en compte explicitement certains paramètres microstructuraux tels que la texture cristallographique ou encore le mouvement des dislocations, et utilisent la théorie de la plasticité cristalline. Une première option consiste à développer de nouveaux modèles élasto-plastiques ou élasto-viscoplastiques avec des caractéristiques générales déduites des modèles de plasticité mono-cristalline. Une autre possibilité est d'utiliser les modèles polycristallins (cf. II.3) pour définir une expression analytique précise de la surface d'écoulement.

II.2.1 Lois de comportement dérivées de la plasticité cristalline

Des travaux ont été réalisés afin de développer de nouveaux modèles macroscopiques à partir de la théorie de la plasticité cristalline [NIN 1996], [KHA 1996] et [KHA 1998]. Nous présentons brièvement le modèle de Ning et Aifantis [NIN 1996].

Ning et Aifantis partent du constat suivant : l'anisotropie induite par la déformation des matériaux polycristallins résulte principalement des glissements cristallographiques dus aux mouvements des dislocations au niveau du grain et à l'évolution de la texture causée par la rotation des grains au niveau de l'agrégat. Pour décrire ces caractéristiques, ils utilisent l'approche

d'invariance d'échelle. Elle permet de prendre en compte les relations constitutives du glissement sous la forme d'équations constitutives macroscopiques. Pour étudier les effets de texture dans les polycristaux déformés plastiquement, ils introduisent une fonction de distribution des orientations (FDO) et un tenseur de texture. Le tenseur de texture peut être calculé de deux façons :

- soit directement, à partir de la FDO
- soit indirectement, avec un ensemble approprié d'équations d'évolution pour les tenseurs d'orientation et l'utilisation d'équations de fermeture.

Ce modèle a été validé dans le cas de chargements complexes de type traction-torsion, pour l'acier inoxydable 304, par comparaison avec l'expérience au niveau de la surface d'écoulement obtenue pour de petites déformations. Cette méthode semble néanmoins applicable en grandes déformations dans la mesure où les tenseurs d'orientation évoluent. Nous ne nous sommes cependant pas étendus sur cette problématique.

II.2.2 Modèles avec surfaces d'écoulement analytiques

Dans ces modèles, une expression analytique de la surface d'écoulement est définie à l'aide de la plasticité cristalline. Les évolutions de la taille et de la position de la surface d'écoulement sont définies par des règles d'écrouissage isotrope et cinématique. Ces modèles d'écrouissage sont des modèles macroscopiques mais ils peuvent présenter des liens importants avec les phénomènes microscopiques.

Ces surfaces d'écoulement analytiques approximent l'écrouissage du matériau et négligent l' « écrouissage géométrique » lié à l'évolution de la texture. En effet, le lien entre la texture et la forme de la surface d'écoulement est calculé une seule fois à l'aide de la texture initiale. Différentes méthodes pour expliciter la fonction analytique d'écoulement basées sur la plasticité cristalline et la connaissance de la texture initiale ont été étudiées. Les principales différences entre ces méthodes peuvent être résumées par les choix suivants :

- exprimer la surface d'écoulement dans l'espace des contraintes ou des vitesses de déformation plastique,
- utiliser une méthode pour prendre en compte la texture,
- prendre en compte ou pas l'écrouissage en introduisant un certain nombre de variables internes pour traduire le mouvement des dislocations.

II.2.2.1 Prise en compte de l'effet de la texture

Différentes méthodes permettent de prendre en compte l'effet de la texture du matériau. Nous en présentons ici quelques-unes.

Darrieulat et Piot en 1996 [DAR 1996] proposent une méthode associée à la représentation de la fonction de distribution des orientations à l'aide de la méthode de la composante de texture. La représentation de la fonction de distribution des orientations à l'aide de la méthode de composantes de texture est explicitée section V.1.2.2. Soit un matériau orthotrope dont ses N composantes de texture sont connues. Une représentation différentiable peut être associée à chacune des composantes de texture à l'aide de la théorie de la plasticité cristalline et le comportement du matériau entier est la moyenne des comportements de chacune des composantes. Darrieulat et Piot font l'hypothèse suivante : ils supposent que le polycristal se comporte comme un cristal ; ils ne considèrent donc pas 12 systèmes de glissement (nombre caractéristique de systèmes de glissement pour un cristal à structure cristalline Cubique Face Centrée) mais 12*N systèmes de glissement. Les orientations de chacun sont données par les données de texture, et chacun des N ensembles va contribuer proportionnellement à sa fraction volumique. Cette hypothèse est réaliste dans le cas où il n'y a pas d'effets spécifiques des joints de grains et pas de distribution spatiale des grains particulière. Si les α_i , i=1,..,N, sont les fractions volumiques de chaque composante de texture, la méthode de combinaison correspond à une moyenne de puissance *n*. Ainsi, la surface d'écoulement est définie comme l'enveloppe interne des hyperplans d'équations :

$$F_n(s) = \left(\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \sum_{g=1}^{12} \left| s : M_i^g \right|^n \right)^{\frac{1}{n}} \qquad \text{(II.8)}$$

où M^g est le tenseur de Schmid pour le système de glissement *g*, et *s* la contrainte déviatorique. L'exposant *n* permet de prendre en compte la distribution d'orientations autour de l'orientation idéale.

Nous citons ici une autre méthode développée par Arminjon et al. [ARM 1991], [ARM 1994a], [ARM 1994b] dans laquelle la représentation de la surface d'écoulement dans l'espace des vitesses de déformation est reliée à la texture. Le potentiel plastique prend la forme :

$$f(D^p) = \sum_{ijkl} v_{ijkl} \frac{D_i^p D_j^p D_k^p D_l^p}{\left\| D^p \right\|^3} = \sum_K v_K \frac{\gamma_K D^p}{\left\| D^p \right\|^3} \qquad \text{(II.9).}$$

Lorsque l'on se restreint au cas des échantillons à symétrie orthotrope, les 22 termes γ_K sont des composantes du 4ème ordre de la vitesse de déformation plastique [BAC 1995]. Les coefficients v_K pondèrent les contributions de γ et sont déterminés par les coefficients C_i de la texture développée en série harmonique :

$$v_K = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} C_i \beta_k^{ij} \qquad \text{(II.10)}$$

Ici, les β_k^{ij} sont les coefficients calculés par la réponse plastique des cristaux indépendamment de la texture. Ils sont solution du problème de minimisation de la différence entre la puissance plastique calculée par la fonction potentiel et la puissance plastique donnée par la plasticité cristalline pour une suite de modes de déformation. Bacroix et Gilormini [BAC 1995] indiquent que 13 termes sont suffisants dans le développement en série pour avoir une quantification adéquate de la fonction de distribution des orientations. Les coefficients β_k^{ij} sont ensuite pondérés par les coefficients de texture. L'évolution de la surface d'écoulement avec la déformation peut être prise en compte par l'actualisation des coefficients de texture suivant des calculs de plasticité cristalline et les coefficients γ_K sont recalculés [ARM 1994].

Une approche similaire à celle du potentiel plastique du 4ème ordre a été développée par Van Houtte et al. [VAN 1989], [VAN 1994], et Hiwatashi et al. [HIW 1997]. Dans ces cas, les termes du potentiel plastique sont étendus. Ce sont des composantes du 6ème ordre de la vitesse de la déformation plastique. Le potentiel plastique est écrit comme :

$$f(\hat{D}^p) = \tau^c D_{vM} G(\tilde{D}^p) \qquad \text{(II.11)}$$

où G est un développement en série des termes de la vitesse de déformation normalisée telle que :

$$G(\tilde{D}^p) = G(\tilde{d}^p) = G_{ijklmn} \tilde{d}_i \tilde{d}_j \tilde{d}_k \tilde{d}_l \tilde{d}_m \tilde{d}_n \qquad i \le j \le k \le l \le m \le n \quad \text{(II.12)}$$

$\tilde{d}^p$ est une forme vectorielle à 5 dimensions de $\tilde{D}^p$, D_{VM} représente le taux de déformation plastique équivalent de Von Mises et τ^c la cission résolue critique. Le développement en série G est calculé à l'aide de la texture cristallographique en déterminant les coefficients G_{ijklmn} qui ajustent le mieux une surface définie par le facteur de Taylor scalaire moyen $\overline{M}$:

$$G(\tilde{D}^p) \approx \sqrt{\frac{2}{3}}\overline{M}(\tilde{D}^p) \qquad \text{(II.13)}$$

Pour les cristaux dont les systèmes de glissement ont une même cission critique résolue d'amplitude *g*, le facteur de Taylor tensoriel du cristal M^C correspondant à un tenseur de déformation $\tilde{D}^p$ vérifie :

$$\sigma^C = M^C(\tilde{D}^P)g \qquad \text{(II.14)},$$

il peut être projeté sur la direction de déformation pour donner un facteur de Taylor scalaire M^C :

$$M^C = \frac{tr(\sigma^C D^C)}{g} \qquad \text{(II.15)}$$

Un facteur de Taylor moyen, représentatif de la texture du matériau, est calculé en utilisant la fonction de distribution des orientations (FDO), dénotée ici *A(r)* :

$$\overline{M} = \int_{\Omega} M^C(r)A(r)d\Omega. \qquad \text{(II.16)}$$

où Ω représente l'espace des orientations cristallines.
Cette représentation a été appliquée à de nombreux matériaux (alliages d'aluminium et aciers notamment).

Darrieulat et Montheillet [DAR 2003] ont proposé un autre modèle pour décrire le comportement plastique d'agrégats orthotropes de cristaux cubiques. Tout d'abord, à chaque composante de texture est associée une équation d'écoulement quadratique, réduite dans le cas où le matériau a une symétrie cubique. Les équations d'écoulement sont ensuite combinées en utilisant deux hypothèses de moyenne qui permettent de décrire le comportement du polycristal à l'aide d'une équation d'écoulement quadratique de type Hill. Les paramètres de la surface d'écoulement sont dérivés analytiquement des orientations et des fractions volumiques de ces orientations. Cette méthode ne prédit pas l'évolution de texture mais les expressions étant analytiques, la surface d'écoulement peut être recalculée assez rapidement à différentes étapes du procédé, si l'on connaît par ailleurs l'évolution de la texture.

Habraken [HAB 2004] propose une autre méthode pour tenir compte de la texture cristallographique : la méthode d'interpolation contrainte-déformation basée sur un modèle polycristallin. La méthode d'interpolation contrainte-déformation décrit le comportement anisotrope mécanique pour une région restreinte de la surface de charge délimitée par 5 tenseurs de contrainte relativement proches. Cette méthode a été utilisée avec le modèle de Taylor pour simuler un cas d'emboutissage.

II.2.2.2. Prise en compte de l'effet de l'écrouissage

Le comportement plastique des métaux dépend non seulement de l'état courant de la déformation mais aussi de l'histoire de la déformation. L'influence de l'histoire de la déformation peut être correctement représentée par un nombre suffisant de paramètres microstructuraux, appelés variables internes.

Un modèle d'écrouissage microstructural a été présenté pour les aciers avec 3 variables internes pour incorporer l'écrouissage anisotrope sous des changements de pas de déformation arbitraires et des grandes déformations modérées [TEO 1995].

Le modèle d'écrouissage microstructural proposé par Li [LI 2003] est décrit par un ensemble de variables internes (R,X,S,P). Pour un matériau recuit, ces variables sont initialement à valeur nulle. La variable scalaire R décrit l'écrouissage isotrope produit au-delà de la limite d'écoulement par des dislocations accumulées statistiquement et caractérise la taille de la surface d'écoulement. Le tenseur du second ordre X décrit l'écrouissage cinématique et caractérise la position du centre de la surface d'écoulement. Le tenseur du $4^{ème}$ ordre S décrit la résistance directionnelle pour une structure de dislocations persistantes. Le tenseur du $2^{ème}$ ordre P est associé à la polarité des structures de dislocations persistantes. Les variables internes suivent des lois d'évolution que nous ne décrirons pas ici. La taille de la surface d'écoulement peut être calculée suivant :

$$\tau = \tau_0 + R + mS \qquad \text{(II.17)}$$

où τ est la cission résolue critique et τ_0 sa valeur initiale, le paramètre m dénote la contribution de S à l'écrouissage isotrope.

Dans [LI 2003] et [HIW 1997], les modèles d'écrouissage ont été couplés au modèle prenant en compte la texture de type Van Houtte et al. [VAN 1994].

II.2.3 Couplage à la méthode EF

Dans l'approche basée sur l'obtention d'une surface d'écoulement déduite de la plasticité cristalline, la surface d'écoulement est ajustée aux données obtenues à l'aide d'un modèle polycristallin. La description de la surface d'écoulement peut donc être beaucoup plus complexe que dans le cas des modèles basés sur des critères macroscopiques. Le nombre de paramètres à déterminer pour la description de la surface d'écoulement reste aussi élevé voire plus élevé que dans le cas des critères macroscopiques.

Cependant, un important avantage par rapport aux surfaces d'écoulement obtenues par des critères macroscopiques est le suivant : il est possible de formuler une loi d'évolution de la forme de la surface d'écoulement basée sur les principes de la déformation plastique. Comme le modèle micromécanique n'est pas entièrement couplé à la méthode EF, l'actualisation de la texture cristallographique n'est pas automatiquement prise en compte. Durant une simulation, la surface d'écoulement reste donc la même que celle définie à l'aide de la texture initiale. Il est cependant possible de calculer l'évolution de la texture cristallographique au cours de la simulation en procédant comme suit [WIN 1996] :

- La texture de l'échantillon (à chaque point d'intégration) est tout d'abord discrétisée.
- Les tenseurs gradients de vitesse incrémentaux sont calculés au cours de la simulation EF en chaque point d'intégration.
- Les tenseurs gradients de vitesse sont ensuite utilisés en entrée d'un modèle polycristallin. Pour chaque orientation cristalline présente dans la texture discrétisée, l'orientation finale est calculée. Les orientations finales calculées présentent la nouvelle texture en chaque point d'intégration.
- A partir de la nouvelle texture, il est possible de calculer la surface d'écoulement actualisée.

Cette procédure va donc permettre d'une part de connaître l'évolution de texture durant la déformation et d'autre part de réactualiser la surface d'écoulement. Cependant, la réactualisation de la surface d'écoulement en fonction de la texture cristallographique entraîne une augmentation du temps de calcul des simulations, réduisant de ce point de vue l'avantage de ce type de modèle.

Remarque : Cette réactualisation de la texture n'est pas nécessaire à chaque incrément de temps, elle dépend de l'amplitude de l'évolution de la texture au cours de la déformation.

II.3 Modèles polycristallins

La réponse mécanique d'une multitude de monocristaux à un chargement peut être décrite par les modèles polycristallins. Connaître la réponse du point matériel consiste à étudier le problème suivant [LOG 1999] :
« Considérons un polycristal mis en déformation plastique par l'imposition d'un champ macroscopique de contrainte et/ou de déformation. Le problème de conditions aux limites consiste à estimer le ou les champs correspondant en tout point du matériau ».

Différents modèles polycristallins ont été développés. Ces modèles sont basés sur les principes de l'homogénéisation. Les différences principales entre les modèles proposés sont :

- les lois constitutives à l'échelle du grain,
- les méthodes de changement d'échelle permettant de passer de l'échelle du grain à l'échelle de l'agrégat polycristallin.

Nous allons dans un premier temps rappeler les principes généraux de l'homogénéisation. Dans un deuxième temps, nous présentons les différentes lois de comportement du grain dans un polycristal. Nous décrivons ensuite les modèles polycristallins les plus répandus :

- les modèles dérivés de l'hypothèse de Taylor
- les modèles auto-cohérents,
- la méthode Eléments Finis,
- la Transformée de Fourier Rapide.

II.3.1 Principes de l'homogénéisation [MAS 1998]

Soit un matériau hétérogène dont les propriétés mécaniques varient sur une distance caractéristique (microscopique) petite devant l'échelle d'un volume élémentaire (macroscopique). A l'échelle du volume élémentaire, le matériau peut être considéré comme homogène. Si l'on considère deux échantillons de ce matériau, la microstructure varie mais les propriétés mécaniques moyennes sont supposées constantes. Un tel volume élémentaire est appelé Volume Elémentaire Représentatif (VER) du matériau hétérogène considéré. Ce volume sera désigné par V et sa surface extérieure par ∂V .

Supposons que le matériau soit constitué de phases distinctes, notées *g*, parfaitement accolées. La loi de comportement d'un tel matériau à un instant *t* donné peut s'écrire :

$$\sigma(t)=F_g[\varepsilon(\tau)]_{\tau=0}^{\tau=t} \quad \text{(II.18)}$$

où F_g désigne une fonctionnelle non linéaire. Cette forme générale de loi de comportement permet de représenter les différents types de comportement : élastiques, élastoplastiques, élastoviscoplastiques.

La méthodologie de l'homogénéisation se déroule en trois étapes : représentation, localisation, homogénéisation.

Dans la première étape « représentation », on définit l'échelle caractéristique d'hétérogénéité et les propriétés mécaniques et physiques correspondantes. Dans le cas des polycristaux, la phase *g* correspond à un ensemble de grains de même composition chimique, de même forme et de même orientation cristalline. La taille d'un grain est en général de quelques dizaines de micromètres, l'échelle macroscopique étant de l'ordre du millimètre, le nombre de phases contenues dans un VER est par conséquent très important. Dans cette étape, après avoir déterminé la nature de la phase, on définit le comportement de chaque phase, sa fraction volumique, sa répartition spatiale, établissant ainsi la relation entre les grandeurs microscopiques. En résumé, il s'agit, dans cette étape, de déterminer dans le cas des polycristaux la loi de comportement à l'échelle du grain ainsi que les différentes orientations cristallographiques des grains et éventuellement leur position relative. Dans notre étude, nous supposerons que tous les grains représentatifs du polycristal possèdent la même loi de comportement et ne différent donc que par leur orientation cristallographique *g*.

L'étape de « localisation » consiste à relier les histoires des grandeurs mécaniques locales (microscopiques) à celles des grandeurs macroscopiques. Dans le cas particulier d'un comportement linéaire élastique, cette étape se ramène à l'estimation des tenseurs de localisation en déformation A ou en contrainte B tels que :

$$\forall x \in V, \qquad \varepsilon(x) = A(x) : E \quad \text{(II.19a)}$$

$$\forall x \in V, \qquad \sigma(x) = B(x) : \Sigma \quad \text{(II.19b)}$$

L'étape d' « homogénéisation » consiste à déterminer le comportement du milieu homogène équivalent associé au VER considéré, appelé comportement effectif du matériau hétérogène. A chaque instant t, la contrainte macroscopique Σ (ou la déformation macroscopique E) peut être définie comme la moyenne spatiale des contraintes (respectivement des déformations) locales, σ (respectivement ε) :

$$\Sigma(t) = \langle \sigma(t) \rangle \text{ avec } \langle \sigma(t) \rangle = \frac{1}{V} \int \sigma(t) dV \quad \text{(II.20a)}$$

ou

$$E(t) = \langle \varepsilon(t) \rangle \text{ avec } \langle \varepsilon(t) \rangle = \frac{1}{V} \int \varepsilon(t) dV \quad \text{(II.20b)}$$

de telle sorte que $\langle A \rangle = \langle B \rangle = I$ où I désigne le tenseur identité du quatrième ordre.

A l'aide d'une hypothèse d'ergodicité, la distinction entre moyennes d'ensemble et d'espace disparaît [BOR 2001a]. L'opération de moyenne spatiale est donc identifiée à une moyenne sur l'ensemble des orientations cristallines dans le cas des polycristaux.

La recherche des champs mécaniques σ et ε solutions des équations (II.19) et (II.20) est équivalente à la résolution d'un problème de structure sur le VER V avec des conditions aux limites imposées à son contour de type déformation homogène ou contrainte homogène.

II.3.2 Vers la modélisation du comportement mécanique des polycristaux

II.3.2.1 Généralités

Les premiers travaux réalisés sur la modélisation de la plasticité des polycristaux sont ceux de Sachs [SAC 1928] et de Taylor [TAY 1938].

Le modèle de Sachs fait l'hypothèse que chaque grain d'un agrégat polycristallin est soumis à la même contrainte et que cette contrainte est égale à la contrainte macroscopique (contrainte uniforme dans l'agrégat). Ce modèle permet d'obtenir une borne inférieure de la contrainte macroscopique. Dans ce modèle, la compatibilité géométrique entre les différents grains n'est pas assurée (déformations non compatibles). Cette première hypothèse permet cependant des prédictions réalistes dans le cas des matériaux à faible symétrie cristalline (roches cristallines par exemple) possédant très peu de systèmes de glissement.

Dans le travail de Taylor, c'est l'hypothèse de déformation plastique uniforme dans l'agrégat qui est faite. Dans ce modèle qui constitue une borne supérieure pour la contrainte macroscopique, tous les grains accommodent la même déformation plastique qui est égale à la déformation macroscopique imposée. Dans ce cas, la compatibilité géométrique est assurée mais la condition d'équilibre des contraintes ne l'est pas. L'hypothèse de ce modèle s'avère réaliste dans le cas des matériaux à grande symétrie cristalline (par exemple cubiques) pour lesquels il existe un grand nombre de systèmes de glissement pouvant ainsi accommoder la déformation quelle que soit l'orientation initiale du grain. Le modèle de Taylor initial ne tient pas compte de la forme du grain, ni de l'interaction entre les grains. Différents modèles dérivés de l'hypothèse de Taylor permettent de pallier ces manques. Nous les présentons en section II.3.3.1.

Les modèles de Sachs et de Taylor ne prennent pas en compte les interactions mécaniques entre grains. Les modèles auto-cohérents ont permis une avancée dans ce sens. Les formulations de ces modèles sont basées sur la solution d'une inclusion ellipsoïdale, représentative du grain, immergée dans un milieu homogène équivalent infini (matrice) représentant l'agrégat polycristallin. Ce formalisme est né des travaux d'Eshelby [ESH 1957] réalisés dans le cadre de l'élasticité linéaire.

Dans le cadre des déformations plastiques, ce formalisme a été repris par Kröner [KRO 1961]. Il propose de représenter tous les grains représentatifs d'une orientation particulière par un grain sphérique représentatif, entouré d'un Milieu Homogène Equivalent (MHE) qui englobe le reste du polycristal. En utilisant le formalisme d'Eshelby, il traite ainsi l'interaction entre le grain et son environnement par une estimation de champ de contrainte élastique causé par la déformation de l'ensemble grain - matrice polycristalline. La relation obtenue prend la forme :

$$\sigma - \Sigma = -\beta\, G(\varepsilon - \mathrm{E}) \qquad \text{(II.21)}$$

où Σ et E sont les tenseurs macroscopiques de contrainte et de déformation, σ et ε ceux du grain représentatif. G est le module de cisaillement élastique et β est une constante. Kröner souligne que le domaine de validité de cette analyse est le domaine des très faibles déformations (<1%). En effet, au-delà de ce domaine les grains sont en écoulement plastique et l'analyse élastique n'est plus applicable. Cependant, l'idée va servir de base pour des modèles plus évolués (cf. section II.3.3.2).

II.3.2.2 Lois constitutives du grain

Différentes lois de comportement à l'échelle intra-granulaire existent. Le choix de l'une ou l'autre de ces lois va dépendre des caractéristiques microstructurales du matériau mais aussi de la gamme de température et de vitesse de déformation envisagée. Nous allons ici énoncer brièvement les différentes lois de comportement classiquement utilisées.

Le comportement rigide-plastique

Le comportement rigide-plastique ne tient pas compte des déformations élastiques du matériau et suppose que chaque système de glissement ne se déclenche qu'à partir d'un seuil de contrainte, en dessous duquel la déformation est considérée comme nulle.

Si les contraintes sont connues (modèle de Sachs), il est assez facile de déterminer les systèmes de glissement qui vont être activés (grâce à la loi de Schmid) et d'en déduire la rotation des grains. Si ce sont les déformations qui sont connues (modèle de Taylor), le calcul n'est plus aussi immédiat, car la solution en terme de systèmes activés et donc de rotation de grains n'est pas toujours unique. Dans sa théorie initiale, Taylor remédie à ce problème en calculant, pour chaque combinaison possible, le travail virtuel correspondant :

$$dW^* = \sum_{s=1}^{N} \tau_c^s \left| d\gamma^s \right| \qquad \text{(II.22)}$$

où τ_c^s et γ^s sont la cission critique et le cisaillement le long du même système de glissement *s*. Taylor fait l'hypothèse que la combinaison correcte est celle qui minimise le travail. Cependant, si on a la même cission critique pour tous les systèmes de glissement, hypothèse classiquement utilisée, plusieurs solutions minimisent le problème, donnant la même contrainte cristalline mais avec néanmoins des rotations de réseau différentes [VAN 2004].

Une amélioration a été proposée par Bishop et Hill [BIS 1951]. En utilisant la représentation de la surface d'écoulement du grain dans l'espace des contraintes, ils montrent qu'une déformation arbitraire ne s'accommode qu'aux sommets de la surface d'écoulement. Chaque sommet est l'intersection d'hyperplans de l'espace des contraintes, qui représentent l'activation d'un système de glissement donné. Pour déterminer le sommet solution, ils utilisent le principe du travail maximum. Le principe du travail maximum de Bishop et Hill et celui du travail virtuel minimum de Taylor

représentent des théories équivalentes [VAN 2004]. L'avantage de la théorie de Bishop et Hill est de diminuer d'entrée le nombre de solutions possibles, et de faciliter la résolution du problème.

Le modèle de Taylor-Bishop-Hill mène à des solutions multiples pour les taux de glissement et la rotation du réseau cristallin lorsque les mêmes valeurs de cissions critiques sont prises pour tous les systèmes de glissement et lorsqu'au moins 5 systèmes de glissement sont activés simultanément. Le problème de l'unicité peut toutefois être résolu en considérant une autre loi constitutive du grain : le comportement viscoplastique.

Le comportement viscoplastique

Le comportement viscoplastique permet de contourner les problèmes d'unicité de solution par rapport à une solution rigide-plastique et de rendre compte du comportement « visqueux » des matériaux à haute température. Là encore, les déformations élastiques sont négligées.

Le comportement viscoplastique dit « sans seuil » peut constituer une approximation raisonnable de la réalité lorsque les déformations sont importantes comme par exemple lors de la mise en forme à chaud des métaux. Ce type de comportement lève le problème d'unicité de solution dans la mesure où la relation entre la contrainte et la vitesse de déformation granulaire est par exemple du type (II.23) [LEB 1993]:

$$\dot{\varepsilon}_k^s = m_k^s \dot{\gamma}^s, \qquad \text{avec} \quad \dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{m_j^s \sigma'_j}{\tau_c^s} \right)^n \qquad \text{(II.23)}$$

où τ_c cission de référence du plan *s*, m_i les facteurs de Schmid, σ' le déviateur des contraintes et où le point désigne une dérivée temporelle.

Ce type de comportement pose cependant un problème lorsqu'il est utilisé dans un modèle auto-cohérent. En effet, la non linéarité de la loi de comportement empêche l'application du principe de superposition utilisé par Eshelby et donc l'exploitation de ses résultats. Différentes techniques de linéarisation sont donc apparues pour contourner ce problème [MOL 1987]. Nous verrons certaines de ces techniques en section II.3.3.2.

Le comportement élasto-plastique

Par rapport au comportement rigide-plastique, ce comportement inclut les déformations élastiques. La solution en terme d'activation des systèmes de glissement se fait en considérant les deux types de grandeurs : élastique et plastique. Les grandeurs plastiques sont utilisées pour un système de glissement donné, uniquement lorsque le seuil de contrainte élastique est atteint. Lorsque la partie plastique des déformations est activée, elle génère une évolution de la surface d'écoulement conséquente aux phénomènes d'écrouissage. Les déformations élastiques mettent en évidence l'apparition de contraintes intergranulaires qui peuvent influencer le comportement mécanique et l'évolution de texture du matériau [LIP 1990]. Cependant, lorsque la température est élevée, l'influence des contraintes intergranulaires diminue.

Le comportement élasto-viscoplastique

Le comportement élasto-viscoplastique inclut, en plus des caractéristiques du comportement élasto-plastique, des effets visqueux non linéaires. Cela revient à inclure des effets de vitesse sur la partie plastique de la déformation. Ce type de comportement est évidemment optimal, mais soulève des difficultés importantes au niveau des techniques d'homogénéisation qui prennent en compte les interactions entre grains [MAS 1998].

II.3.3. Changement d'échelle

II.3.3.1 Modèles de type Taylor [VAN 2004] , [VAN 2005b]

Le terme « Modèles de type Taylor » signifie que des hypothèses simples pour les relations entre les déformations macroscopiques et mésoscopiques sont utilisées. La plus connue de ces hypothèses est l'hypothèse de Taylor [TAY 1938] : la déformation plastique est la même pour tous les cristaux d'un polycristal et égale à la déformation plastique macroscopique. Diverses variantes de ce modèle sont apparues afin de pallier l'absence d'équilibre des contraintes.

Le point commun de tous ces modèles est le fait que les systèmes de glissement activés, les taux de glissement, le taux de rotation du réseau et la contrainte déviatorique agissant sur les grains individuels peuvent être calculés pour chaque grain séparément ou pour au plus quelques grains ensemble [VAN 2004]. Avant de présenter brièvement les différents modèles dérivés de l'hypothèse de Taylor, nous rappelons le modèle de Taylor dans sa forme générale, appelé classiquement le modèle *« Full Constraints »*.

Le modèle « Full Constraints » de Taylor (noté FC) [TAY 1938]

La transition de l'échelle mésoscopique à l'échelle macroscopique utilise le fait que le tenseur gradient de vitesse local est égal au tenseur gradient de vitesse macroscopique. Cette hypothèse ne permet pas l'équilibre des contraintes à la frontière des grains. Il donne cependant des résultats valables dans le cas de matériaux à symétrie cubique et à grains équiaxes. Pour pallier ce problème d'équilibre de contraintes, différents modèles ont vu le jour.

Le modèle « Relaxed Constraints » de Taylor (noté RC) [HON 1981], [KOC 1982], [VAN 1982]

L'idée de ce type de modèle est en partie née de la constatation suivante : après une certaine quantité de déformation lors du laminage, les grains tendent à devenir plats et allongés. Cela signifie que, pour des raisons géométriques, une différence entre l_{13} (composante de cisaillement dans le plan (x1, x3) du gradient de vitesse local) et L_{13} (valeur macroscopique) est acceptable (Figure II.1). Une première idée est donc de ne pas prescrire cette composante du gradient de vitesse et d'imposer plutôt la condition $\sigma'_{13} = 0$.

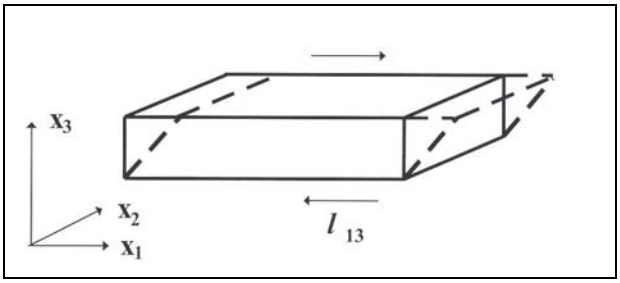


Figure II.1 *Grains allongés et plats obtenus après laminage (x1 = RD, x3 = ND). Le cisaillement l_{13} est relâché [VAN 2005b].*

Un autre type de modèle consiste à omettre deux équations : celle concernant le gradient de vitesse l_{13} et celle concernant l_{23}. La résolution de ce problème se fait alors en imposant les contraintes :

$$\sigma'_{13} = 0 \text{ et } \sigma'_{23} = 0 \quad \text{(II.24).}$$

L'équilibre des contraintes est donc satisfait à la frontière des grains pour les composantes 13 et 23.

Alors que le modèle *FC* permet de considérer n'importe quel mode de déformation, les modèles *RC* sont généralement restreints à certains modes de déformation. Ils ont principalement été développés pour les métaux à grains plats et allongés. Dans le cas du laminage, ils permettent de mieux prédire la compatibilité des contraintes en comparaison avec la solution obtenue à l'aide du modèle *FC*.

Modèles RC multi-grains

Les prédictions de texture de déformation ne sont pas réellement meilleures avec les modèles *RC* qu'avec les modèles *FC* du point de vue de l'intensité des FDOs. La forme des FDOs (c'est-à-dire les composantes présentes) est quant à elle mieux prédite [VAN 2005b]. Pour pallier ce problème, des modèles « multi-grains » ou « N-sites » prenant en compte l'interaction entre grains ont vu le jour. Nous citons ici quelques modèles RC de type « multi-grains ».

1°) Le modèle LAMEL [VAN 1999, 2002]

Le modèle LAMEL a été conçu pour les procédés de laminage et pour les matériaux avec des grains allongés et plats. Il considère des assemblages de deux grains. Si l'on considère les relaxations de type I et II représentées Figure II.2, le modèle LAMEL permet de satisfaire les conditions de contrainte suivantes à l'interface entre les deux grains indexés par *1* et *2* :

$$\sigma'^{\,1}_{13} = \sigma'^{\,2}_{13} \text{ et } \sigma'^{\,1}_{23} = \sigma'^{\,2}_{23} \quad \text{(II.25).}$$

L'équilibre des contraintes est donc assuré sans pour autant imposer que ces contraintes de cisaillement soient nulles comme dans la théorie *RC* (cf . équation II.24). Les conditions de Taylor sont appliquées non plus sur chaque grain mais sur l'ensemble des 2 grains. La quantité de relaxation à appliquer sur chaque ensemble de 2 grains se calcule par un principe de minimisation d'énergie (cf. [VAN 1999,2002]).

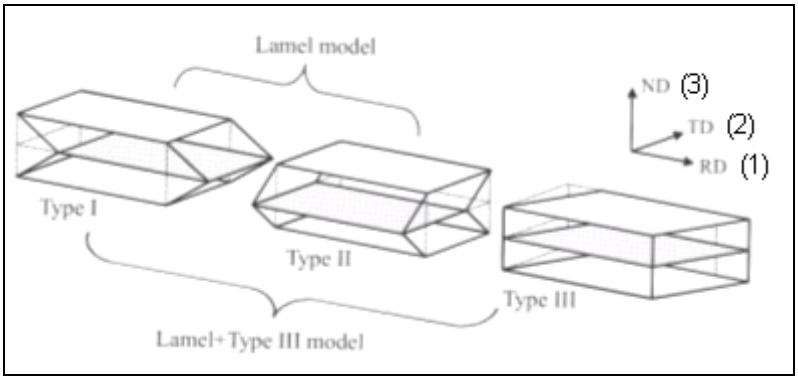


Figure II.2 *Illustration de 3 types de relaxation considérés dans le modèle LAMEL et le modèle LAMEL + type III [VAN 2005b].*

2°) Le modèle ALAMEL [VAN 2005a]

Pour pallier la restriction du domaine de validité des modèles à contraintes relâchées (procédé de laminage, grains allongés et plats), Van Houtte et al. [VAN 2005a] proposent un autre modèle qui vérifie les hypothèses suivantes :

- Le tenseur gradient de déformation local n'est pas constant à l'intérieur d'un grain (Figure II.3), les taux de glissement non plus.

- Dans les régions proches des frontières des grains, les contraintes locales et les taux de déformation et de glissement cristallographique sont hautement affectés par l'interaction avec les grains voisins.
- L'ensemble des orientations cristallographiques qui se développent dans les régions proches des frontières des grains peut être vu comme la contribution du grain sur la déformation du polycristal entier.

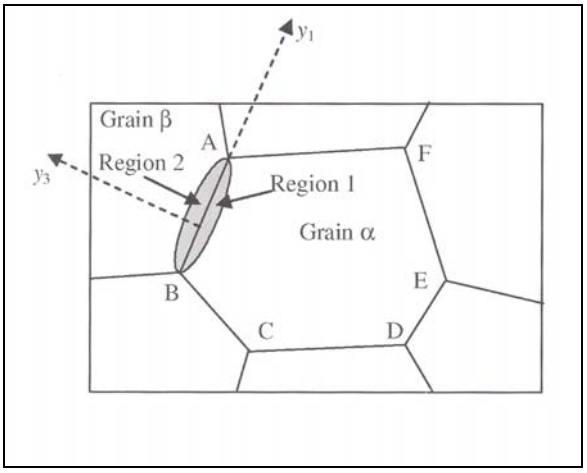


Figure II.3 *Représentation schématique de la microstructure [VAN 2005a].*

Nous ne précisons pas la formulation mathématique du problème qui est présentée dans [VAN 2004]. Ce modèle permet de considérer tout mode de déformation, dans la mesure où la nature géométrique des relaxations n'est plus reliée à la géométrie de la déformation prescrite comme dans le cas du modèle *RC* ou du modèle *LAMEL*.

3°) Le modèle *GIA* (Grain InterAction)

Le modèle *GIA* a été proposé par Crumbach et al. [CRU 2001]. Tout comme le modèle *LAMEL*, il prend en compte les interactions entre grains voisins mais au lieu d'opérer sur un « cluster » contenant 2 grains, il utilise un « cluster » composé de 8 grains. L'hypothèse de Taylor est là encore vérifiée sur l'ensemble du cluster, cela permet un relâchement des contraintes sur chacun des grains à l'intérieur du cluster. Ces relaxations sont pénalisées cette fois par un terme énergétique.

II.3.3.2 Modèles auto-cohérents

Ces modèles de changement d'échelle font le lien entre les grandeurs locales du grain, tour à tour chaque grain/inclusion dans un Milieu Homogène équivalent, et les grandeurs globales du polycristal par un formalisme de type Eshelby [ESH 1957]. Le comportement macroscopique est obtenu en imposant l'égalité entre les champs de déformation et/ou de contrainte imposés, et la moyenne sur tous les grains des grandeurs équivalentes. L'équation qui en résulte est de type implicite et se résout de manière itérative en démarrant à partir d'une valeur approximée du comportement polycristallin.

Cette catégorie de modèles est utile lorsque l'uniformité de la déformation des grains n'est pas une hypothèse raisonnable ou lorsque l'on veut une meilleure solution que celle donnée par les modèles de Sachs et de Taylor. Lorsque le matériau possède plusieurs systèmes de glissement avec des cissions critiques dissemblables (matériau à faible symétrie cristalline) ou lorsque les grains ont initialement une grande variété de tailles et/ou de formes, l'interaction de chaque grain avec son entourage devient très directionnelle, et l'anisotropie relative joue un rôle très important dans la répartition de la déformation plastique de part et d'autre.

Différentes stratégies ont été proposées dans la littérature. Elles se différencient principalement par le comportement supposé de chaque grain et du Milieu Homogène Equivalent qui

les entoure, ainsi que par la méthode utilisée pour approximer la solution de l'équation constitutive locale non linéaire.

Les principales méthodes de linéarisation des lois constitutives locales sont :

- la formulation incrémentale de Hill [HIL 1965] : $\dot{\sigma}=l:\dot{\varepsilon}$ où l est le module instantané,
- les méthodes du premier ordre :
  - pour la méthode sécante : $\sigma=m_s:\dot{\varepsilon}$ où m_s est le module sécant [HUT 1976],
  - pour la méthode tangente : $\sigma=l:\dot{\varepsilon}+\sigma^0$ où l est le module tangent [MOL 1987],
  - pour la méthode affine : $\sigma=l:\varepsilon+\sigma^0$ où $l=\frac{d^2w}{d\varepsilon^2}(\varepsilon)$ et $\sigma^0=\frac{dw}{d\varepsilon}(\varepsilon)-l(\varepsilon):\varepsilon$ avec w le potentiel d'énergie libre en déformation [MAS 1998],
- la méthode du second ordre de Ponte Casteneda, où le module local est évalué non plus à l'aide de la moyenne par phase de la déformation locale (moment d'ordre 1) comme dans le cas de l'approche sécante avec des constituants isotropes mais à l'aide du moment d'ordre 2 sur la phase considérée [SUQ 1995], [PON 1996].

Selon la loi de comportement constitutive du grain considérée, nous spécifions les stratégies de linéarisation utilisées. Pour les détails concernant la mise en équation de ces problèmes, le lecteur pourra se référer aux articles cités.

Modèles élasto-plastiques

Le modèle de Kröner [KRO 1961] néglige les interactions plastiques entre l'inclusion et la matrice qui l'entoure. Pour pallier cette restriction, Hill [HIL 1965] a proposé une formulation auto-cohérente incrémentale généralisée pour les petites déformations dans le cadre de l'élasto-plasticité. Dans cette approche, il est supposé que le milieu infini dans lequel est plongé chaque inclusion possède un module uniforme, alors qu'en réalité l'écrouissage n'est pas uniforme autour de l'inclusion. Cette approche, implémentée par Hutchinson [HUT 1970] pour simuler les déformations d'un agrégat de grains CFC, permet d'obtenir une réponse beaucoup moins raide que celle obtenue à l'aide du modèle de Kröner. Pour simplifier la loi d'interaction et tenir compte des interactions plastiques, Berveiller et Zaoui [BER 1979] ont proposé une autre approche.

Pour formuler le schéma auto-cohérent dans le cadre des grandes déformations, Iwakuma et Nemat-Nasser [IWA 1984] ont proposé une extension de l'approche incrémentale de Hill. Dans cette approche, les comportements locaux et globaux sont exprimés pour des déformations finies. Lipinski et al. [LIP 1990,1992] ont utilisé ce modèle pour simuler les grandes déformations et l'évolution de texture dans le cas des polycristaux CFC et CC.

Les lois d'interaction élasto-plastiques ont permis de prédire une réponse plus molle que celle du modèle de Kröner, purement élastique. Cependant cette réponse reste souvent plus dure qu'attendue. Molinari [MOL 1997] attribue ce fait à la linéarisation incrémentale proprement dite, qui mène à une accumulation d'erreurs dues à l'hypothèse d'un module instantané uniforme dans la matrice.

Une nouvelle formulation, la formulation affine, a été ensuite développée pour des comportements élasto-plastiques. Masson et al. en 2000 [MAS 2000] l'appliquent à un polycristal CFC ayant une texture aléatoire. Ils montrent que la formulation affine permet d'obtenir une réponse plus molle que celle obtenue par la formulation incrémentale. La formulation affine peut être appliquée à n'importe quel type de microstructure et pour n'importe quel type de loi constitutive. Elle mène à des prédictions intermédiaires entre la formulation sécante et la formulation tangente, sans recours à des paramètres calibrés a priori [BOR 2001b].

Modèles élasto-viscoplastiques

Pour inclure la viscosité, Weng [WEN 1982] a proposé une extension des modèles de Hill et de Kröner dans le cas des petites déformations élasto-viscoplastiques. Nemat-Masser et Obata [NEM 1986] ont étendu cette formulation aux grandes déformations. Cependant, ces approches considèrent des interactions grain-matrice beaucoup trop fortes.

L'erreur de ce genre d'approche vient d'une mauvaise prise en compte de l'aspect visqueux de la déformation plastique. Pour pallier ce problème, différentes modélisations du comportement élasto-viscoplastique apparaissent. Le principe consiste à convertir le problème élasto-viscoplastique en un problème viscoélastique, linéaire par incrément [NAV 1996]. Une autre approche décrite dans [MOL 1997], non incrémentale cette fois, a été appliquée aux petites déformations.

Modèles viscoplastiques

Hutchinson [HUT 1976] a proposé une extension du schéma auto-cohérent de Hill dans le cas de déformations viscoplastiques. Molinari et al. [MOL 1987] ont ensuite développé une formulation non incrémentale, basée sur une approximation tangente de la relation non linéaire entre contrainte et taux de déformation pour la modélisation du comportement mécanique et des évolutions de textures en grandes déformations. Lebensohn et Tomé [LEB 1993] ont amélioré ce schéma non incrémental pour simuler les grandes déformations plastiques pour les matériaux hexagonaux, trigonaux et orthorombiques.

En plus de la formulation affine, des approches variationnelles ont été développées. Elles permettent d'obtenir des bornes rigoureuses pour les potentiels de dissipation effectifs. Elles sont en général plus difficiles à implémenter. La méthode variationnelle du second-ordre de Ponte Castaneda [PON 1996] a été implémentée par Bornert et al. [BOR 2001b] et Lebensohn et al. [LEB 2005] dans le cas des matériaux à comportement viscoplastique.

Ces différentes approches (AFFine, TanGente, SECante , Second-Ordre) ont été comparées par [LEB 2005] du point de vue de la prédiction de propriétés effectives en fonction de la sensibilité à la vitesse de déformation de polycristaux FCC avec une texture aléatoire, dans le cas d'une traction uniaxiale (loi constitutive viscoplastique). La Figure II.4 illustre les courbes du Facteur de Taylor moyen en fonction de la sensibilité à la vitesse de déformation (*1/n*) pour les différentes approches. Le facteur de Taylor moyen est donné par Σ_{eq} / τ_0 où τ_0 est la cission d'écoulement des systèmes de glissement (111)<100> et où Σ_{eq} est la contrainte macroscopique équivalente correspondant à une déformation appliquée unitaire $E_{eq} = 1$. Il a été observé que :

- La courbe Facteur de Taylor prédite par l'approche de Taylor est la plus élevée, ce qui est totalement en accord avec le fait que l'approche de Taylor fournit une borne supérieure des contraintes.
- Toutes les estimations excepté le modèle de Taylor coïncident dans le cas n=1 qui est le cas linéaire.
- Pour les sensibilités à la vitesse modérées et élevées (*1/n* petit), la procédure du second-ordre (SO) donne le facteur de Taylor le plus bas, comparée aux autres approches auto-cohérentes. Ceci traduit le fait que le comportement effectif au niveau du grain est plus mou. En effet, l'approche du second-ordre a l'avantage de prendre en compte les fluctuations des champs pour la détermination du comportement linéarisé des grains.
- Pour les sensibilités à la vitesse extrêmes, lorsque les modèles sécants et tangents tendent respectivement vers des bornes supérieures et inférieures, les approximations du second-ordre et affines donnent des résultas intermédiaires.

Selon le degré de non-linéarité, les différentes approches permettent de plus ou moins bien rendre compte du comportement effectif des matériaux.

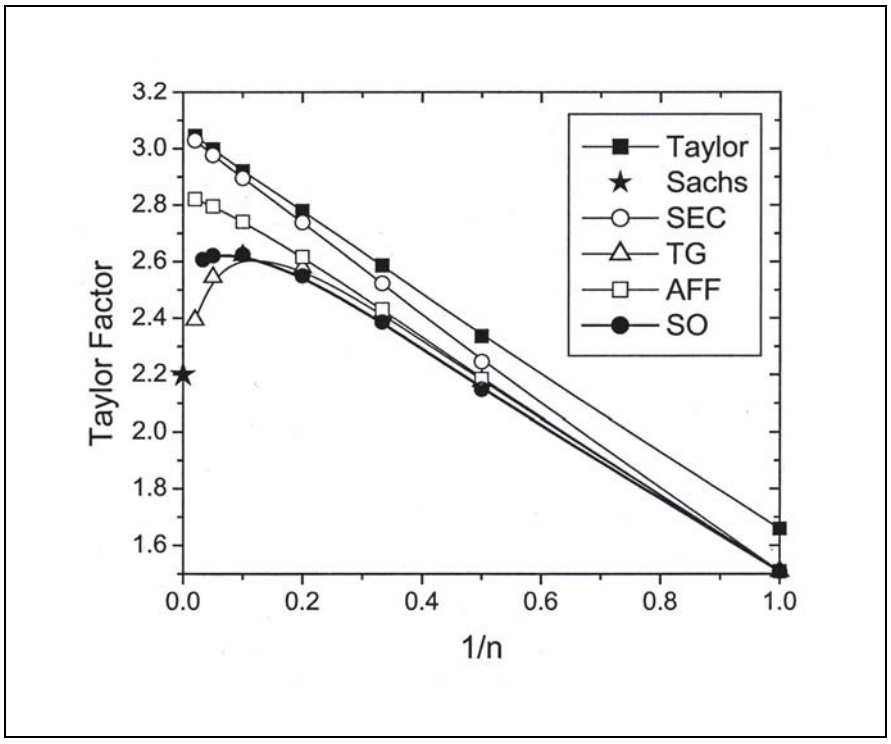


Figure II.4 *Evolution de la prédiction du facteur de Taylor en fonction de la sensibilité à la vitesse de déformation et des différentes approches considérées [LEB 2005].*

II.3.3.3 Méthode des Eléments Finis appliquée à un polycristal

Une autre méthode pour prédire le comportement mécanique anisotrope des matériaux polycristallins est la méthode des Eléments Finis (EF). Les cristaux représentatifs du polycristal sont maillés individuellement. A chaque EF les principes de la plasticité mono-cristalline sont appliqués et la loi constitutive macroscopique du polycristal est obtenue par le calcul mécanique sur les EFs. Avec cette approche, équilibre et compatibilité entre les grains sont obligatoirement respectés au sens faible des EFs. La figure II.5 illustre le schéma de principe de cette approche.

Cette méthode a principalement été utilisée pour comprendre le comportement mécanique d'un polycristal. Ce type d'approche permet en effet d'étudier :

- l'effet de l'interaction entre les grains sur les courbes de contrainte/déformation et l'évolution de texture,
- les systèmes de glissement qui sont actifs et les densités de dislocation locales afin de discuter des impacts de l'accommodation intergranulaire et de l'hétérogénéité intragranulaire.

Pour plus de détails sur ces applications, le lecteur pourra se référer à [BEC 1991], [BEA 1995], [SAR 1996], [MIK 1998] et [DEL 2000].

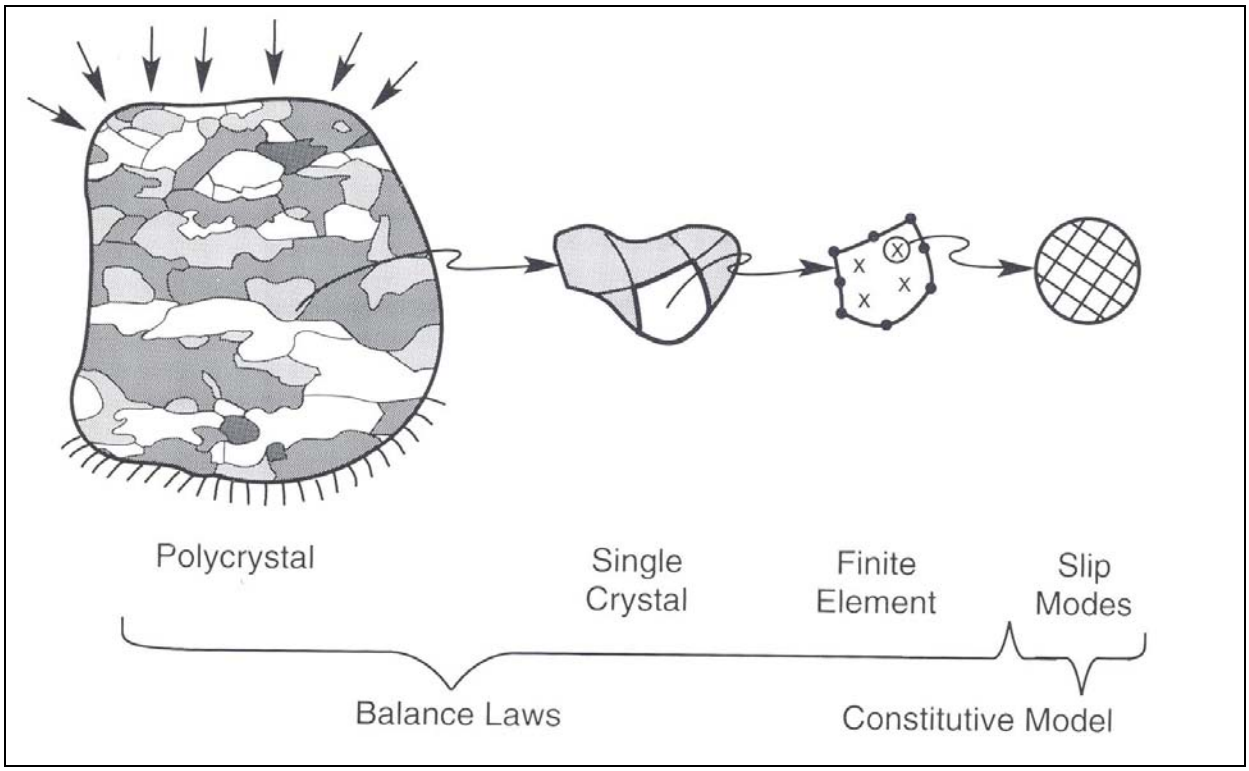


Figure II.5 *La méthode des Elements Finis [KOC 1998].*

II.3.3.3.4 Transformée de Fourier Rapide

La méthode TFR est généralement utilisée pour décrire le comportement mécanique dans le cas des matériaux composites. Elle a été récemment appliquée au cas des polycristaux soumis à des conditions aux limites périodiques par Lebensohn et al. [LEB 2001], [LEB 2004]. Lebensohn a montré que la performance numérique en terme de temps de calcul de la TFR est largement supérieure à celle de la méthode des Eléments Finis pour des problèmes de même taille. La méthode TFR est cependant restreinte à des problèmes pour lesquels il est possible d'identifier un VER et d'appliquer des conditions aux limites périodiques. Cette méthode n'est donc actuellement pas directement applicable au cas des simulations de procédés de mise en forme.

II.3.4 Couplage des modèles polycristallins à la méthode EF

L'idée du couplage entre le modèle EF et les modèles polycristallins [DAW 2003] est d'utiliser la théorie de plasticité cristalline comme loi de comportement à chaque point d'intégration du maillage EF comme illustré Figure II.6. Le polycristal est représenté par un ensemble de mono-cristaux (typiquement de l'ordre de 1000). A chaque fois que le code EF a besoin d'information sur le comportement mécanique aux points d'intégration de chaque EF, le modèle micromécanique (modèle polycristallin) est appelé. L'actualisation de la texture cristallographique dans ce type de couplage est donc automatiquement prise en compte.

L'avantage de ce type d'approche est le couplage direct entre la texture et le procédé de mise en forme. Lorsque le modèle EF est couplé à un modèle de Taylor ou encore un modèle auto-cohérent, les deux écrouissages « matériau » ou « latent » et « textural » ou « géométrique» sont pris en compte. L'hétérogénéité de déformation parmi les cristaux, la forme des grains et l'interaction entre les grains sont ainsi décrites au niveau microscopique. Ce couplage permet de prédire correctement l'anisotropie mais aussi l'évolution de la texture cristallographique et de l'anisotropie induite au cours de la déformation.

Cependant le temps de calcul de ce type de couplage est très important. En effet, le temps CPU du modèle polycristallin est généralement proportionnel au nombre de cristaux représentatifs

(cela dépend de loi de comportement retenue pour le glissement cristallographique), et ce modèle est appelé à chaque point d'intégration du maillage EF. Comparé au temps de calcul relatif à l'utilisation d'un modèle avec surface d'écoulement non réactualisée (cf. section II.2.2), le temps de calcul du couplage avec les modèles polycristallins est donc très important.

Lorsqu'un modèle EF « microstructural » (cf. II.3.3.3.3) est lui-même couplé au modèle EF à l'échelle d'une pièce macroscopique (couplage connu sous le nom de méthode FE^2), l'évolution de texture, la forme des grains et les effets de topologie, l'interaction entre les grains, les distributions de contrainte et de déformation hétérogènes sont prises en compte. La méthode FE^2 [SMI 1998], [MIE 1999] résout un problème EF, dont les conditions aux limites évoluent de manière non linéaire ce qui augmente encore davantage le temps de calcul comparé à l'utilisation des modèles polycristallins tels que les modèles de Taylor ou auto-cohérents.

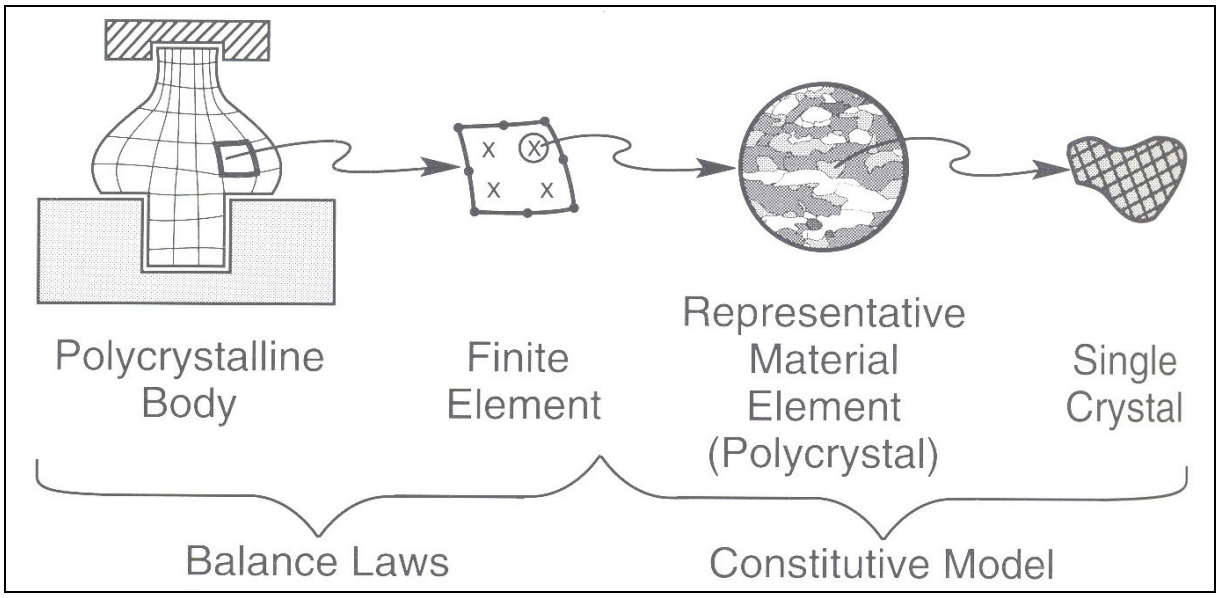


Figure II.6 *Couplage Modèles polycristallins / Méthode EF [KOC 1998].*

II.4 Microstructure Sensitive Design

Une nouvelle méthode, la méthode *MSD*, a été récemment développée par Kalidindi et al. et est utilisée de diverses manières [KAL 2004], [KAL 2005]. Elle a été initialement mise en place pour faciliter la résolution de problèmes inverses dans le design de la microstructure des matériaux, c'est-à-dire pour répondre à la question suivante : « quelle doit être au départ la microstructure du matériau si l'on veut qu'il possède une certaine propriété ? ». Nous allons préciser l'application de la méthode dans le cadre des polycristaux.

Pour la prédiction de l'anisotropie due à la texture cristallographique, la méthode *MSD* considère la représentation de la fonction de distribution des orientations $f(g)$, non pas sous la forme discrète comme dans le cas des modèles polycristallins mais sous la forme d'un développement en série dans l'espace de Fourier. Cette représentation a été mise en place par Bunge [BUN 1993]. Elle permet de représenter la texture de l'échantillon comme un point dans l'espace de Fourier de dimension infinie, défini par les coefficients du développement de la FDO en série de Fourier. Les procédures pour obtenir les coefficients de Fourier pour une fonction $f(g)$ utilisent en général une transformée de Fourier inverse. Elles sont détaillées dans [BUN 1993].

L'espace d'Euler complet, représentant toutes les orientations possibles pour un monocristal, est discrétisé en un certain nombre d'orientations, ici environ 1000 mono-cristaux répartis uniformément. Les coefficients de Fourier pour chacun de ces mono-cristaux sont calculés.

Pour calculer la contrainte résultante de l'application d'une déformation macroscopique donnée sur le polycristal, les auteurs procèdent de la manière suivante :

- La dépendance fonctionnelle de chaque composante de contrainte monocristalline par rapport à l'orientation du réseau cristallin est exprimée dans l'espace de Fourier par des techniques de régression linéaire, pour différents tenseurs de gradient de vitesse imposés.
- La contrainte sur le polycristal entier est ensuite déduite de l'expression (hypothèse de Taylor) :

$$\overline{\sigma}_{ij} = \iiint f(g)\sigma_{ij}(g)dg \qquad \text{(II.26).}$$

Ensuite, pour déterminer l'évolution de la texture, Kalindidi et al. [KAL 2005] utilisent la loi de transformation linéaire définie par Bunge et Esling [BUN 1984] qui donne l'évolution des coefficients de Fourier d'une texture pour un incrément de déformation donné en fonction des coefficients de la texture initiale et de constantes liées aux sollicitations mécaniques. Ces derniers paramètres peuvent être calibrés à l'aide du modèle de Taylor ou de mesures expérimentales, ou encore être aussi interpolés pour d'autres modes de déformation, après avoir été calculés une première fois pour certains modes. Une fois ces paramètres déterminés, cette représentation de l'évolution des coefficients de texture peut être utilisée récursivement pour prédire des textures pour de grandes déformations.

Cette méthode est en plein développement. Actuellement, seulement certains tests ont été réalisés dans un cadre très simplifié afin de discuter de l'interpolation des variables et du nombre de termes nécessaire dans le développement en séries de Fourier [KAL 2005]. Nous pouvons imaginer le gain en temps de calcul offert par cette méthode une fois le matériau calibré (états de contrainte calculés en fonction de la déformation et des différents coefficients de Fourier possibles).

Conclusion

La revue des différents modèles permettant de décrire l'anisotropie lors de la mise en forme de procédés simulés par la méthode des Eléments Finis nous amène à choisir pour notre travail les modèles polycristallins.

En effet, comparés aux modèles d'anisotropie décrits à l'aide d'une surface d'écoulement analytique, ils permettent de mieux tenir compte de l'effet de texture et de connaître, au cours de la déformation, l'évolution de la texture cristallographique et de l'anisotropie. S'il fallait réactualiser la surface d'écoulement périodiquement, le temps de calcul serait sans doute du même ordre.

La méthode FE^2 permet de mieux tenir compte de la physique que le couplage des autres modèles polycristallins (Taylor, Auto-Cohérent) à la méthode EF. Cependant, l'utilisation de cette méthode génère des temps de calcul prohibitifs.

Le choix du modèle polycristallin dépend, comme nous l'avons vu, entre autres de la structure cristalline du matériau. Les matériaux que nous étudions ont tous une structure cubique CFC. Nous avons donc choisi d'utiliser un modèle polycristallin dérivé de l'hypothèse de Taylor et notre choix s'est porté sur un modèle élasto-viscoplastique [DEL 2005], [DEL 2006].

Références bibliographiques

[ARM 1991] M. Arminjon, B. Bacroix, On plastic potentials for anisotropic metals and their derivation from the texture function, Acta Mechanica 88, pp. 219-243, 1991.

[ARM 1994a] M. Arminjon, B. Bacroix, D. Imbault, J.L. Raphanel, A fourth-order plastic potential for anisotropic metals and its analytical calculation from texture data, Acta Mechanica 107, pp. 33-51, 1994.

[ARM 1994b] M. Arminjon, D. Imbault, An analytical micro-macro model for textured polycrystals at large strain deformations, Int. J. Plasticity 10, pp. 825-847, 1994.

[BAC 1995] B. Bacroix and P. Gilormini, Finite-element simulation of earing in polycrystalline materials using a texture-adjusted strain-rate potential, Modelling and Simulation in Material Science and Engineering 3, pp. 1-21, 1995.

[BAR 1989] F. Barlat and J. Lian, Plastic behaviour and stretchability of sheet materials. Part I : A yield function for orthotropic sheet under plane stress conditions, Int. J. Plasticity 5, pp. 51-66, 1989.

[BAR 2005] F. Barlat, H. Aretz, J.W. Yoon, M.E. Karabin, J.C. Brem and R.E. Dick, Linear transformation-based anisotropic yield functions, Int. J. Plasticity 21, pp. 1009-1031, 2005.

[BEA 1995] A.J. Beaudoin, P.R. Dawson, K.K. Mathur and U.F. Kocks, A hybrid finite element formulation for polycrystal plasticity with consideration of macrostructural and microstructural linking, Int. J. Plasticity 11 (5), pp. 501-521, 1995.

[BEC 1991] R. Becker, Analysis of texture evolution in channel die compression – I. Effects of grain interaction, Acta Metall. Mater 39 (6), pp. 1211-1230, 1991.

[BER 1979] M. Berveiller and A. Zaoui, An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals, J.Mech. Phys. Solids 26, pp. 325-344, 1979.

[BIS 1951] J.F.W. Bishop and R.Hill, A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses, Phil. Mag. 42, pp. 414-427, 1951

[BOR 2001a] M. Bornert, T. Bertheau, P. Gilormini, Homogénéisation en mécanique des matériaux 1 Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques, Paris, Hermes Science Publications, 2001.

[BOR 2001b] M.Bornert, R. Masson, P. Ponte Castaneda, A. Zaoui, Second-order estimates for the effective behaviour of viscoplastic polycrystalline materials, J. Mech. Phys. Solids 49, pp. 2737-2764, 2001.

[BUN 1984] H.J. Bunge, C. Esling, Texture development by plastic deformation, Scripta Metall. 18, pp. 191-196, 1984.

[BUN 1993] H.J. Bunge, In : Texture analysis in Materials Science. Mathematicals methods. Curvillier, Verlag, Göttingen, 1993.

[CRU 2001] M. Crumbach, G. Pomana, P. Wagner, G. Gottsein, A Taylor-type deformation texture model considering grain interaction and material properties, Part I : Fundamentals, In : G. Gottsein and D.A. Modolov (Eds.), Recrystallisation and Grain Growth, Proc. First Joint Conference, Springler, Berlin, pp. 1053-1060, 2001.

[DAR 1996] M. Darrieulat and D. Piot, A method of generating analytical yield surfaces of crystalline materials, Int. J. Plasticity 12, pp. 1221-1240, 1996.

[DAR 2003] M. Darrieulat, F. Montheillet, A texture based continuum approach for predicting the plastic behaviour of rolled sheet, Int. J. Plasticity 19, pp. 517-546, 2003.

[DAW 2003] P.R. Dawson, S.R. MacEwen and P-D. Wu, Advances in sheet metal forming analyses : dealing with mechanical anisotropy from crystallographic texture, International Material Reviews, 48, N°2, pp. 86-122, 2003.

[DAW 2004] P.R. Dawson, Crystal Plasticity, In : Continuum Scale Simulation of Engineering Materials, Eds D. Raabe, F. Roters, F. Barlat , L Chen, pp. 115-143, 2004.

[DEL 2000] F. Delaire, J.L. Raphanel and C. Rey, Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension : experimental study and finite element simulations, Acta. Mater. 48, pp. 1075-1087, 2000.

[DEL 2005] Delannay L, Logé R.E., Signorelli J.W. and Chastel Y, Evaluation of a multisite model for the prediction of rolling textures in hcp metals, International Journal of Forming Processes, 8, 2-3, pp. 159-178, 2005.

[DEL 2006] Delannay L., P.J. Jacques, S.R. Kalindidi, Finite element modeling of crystal plasticity with grains shaped as truncated octahedrons, Int. J. Plasticity, 22, pp. 1879-1898, 2006.

[ESH 1957] J.D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and relayed problems, Proc. Roy. Soc. London A 241, pp. 376-396, 1957.

[HAB 2004] A.M. Habraken and L. Duchêne, Anisotropic elasto-plastic finite element analysis using a stress-strain interpolation method based on polycrystalline model, Int. J. Plasticity 20, pp. 1525-1560, 2004

[HIL 1948] R. Hill, A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic materials, Proc. Roy. Soc. London, A 193, pp. 281-297, 1948.

[HIL 1965] R. Hill, Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals, J. Mech. Phys. Solids 13, pp. 89-101, 1965

[HIL 1979] R. Hill, Theorical plasticity of textured aggregates, Math. Proc. Cambridge Philos. Soc., 85, pp. 179-191, 1979.

[HIL 1987] R. Hill, Constitutive dual potentials in classical plasticity, J. Mec. Phys. Solids 35, pp. 22-33, 1987.

[HIW 1997] S. Hiwatashi, A. Van Bael, P. Van Houtte and C. Teodosiu, Modelling of plastic anisotropy based on texture and dislocation structure, Computational Materials Science 9, pp. 274-284, 1997.

[HON 1981] H. Honeff and H. Mecking, Analysis of the deformation texture at different rolling conditions. In : S. Nagamashi (Ed.), Proceedings of the 6th International Conference on Textures of Materials, vol.1.The Iron and Steel Institute of Japan, Tokyo, pp. 347-355, 1981.

[HOS 1972] W.F. Hosford, A generalized isotropic yield criterion, J. Appl. Mech. Trans. ASME 39, pp. 607-609, 1972.

[HOS 1979] W. F. Hosford, On yield loci of anisotropic cubic metals, Proc. 7th North American Metalworking Conf. SME – Deaborn, MI, pp. 191-197, 1979.

[HUT 1970] J.W. Hutchinson, Elasto-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites, Proc. Roy. Soc. London, A 319, pp. 247-272, 1970.

[HUT 1976] J.W. Hutchinson, Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials, Proc. R. Soc. A 348, pp. 101-127, 1976.

[IWA 1984] T. Iwakuma and S. Nemat-Nasser, Finite elastic-plastic deformation of polycrystalline metals, Proc. Roy. Soc. London A 394, pp. 87-119, 1984.

[KAL 2004] S.R. Kalidindi, J.R. Houskamp, M. Lyons, Brent L. Adams, Microstructure sensitive design of a orthotropic plate subjected to tensile load, Int. J. Plasticity 20, pp. 1151-1575, 2004.

[KAL 2005] S.R. Kalidindi, H.K. Duwuru, Spectral methods for capturing crystallographic texture evolution during large plastic strains in metals, Acta Materiala 53, pp. 3613-3623, 2005.

[KAL 2005] S.R. Kalidindi, J. Houskamp, G. Proust and H. Duvvuru, Microstructure sensitive design with first order homogeneization theories and finite elements codes, Proceedings of the 14th International Conference on Textures of Materials, July 11th-15th, 2005, Leuven, Belgium, 2005.

[KHA 1996] A.S. Khang and P. Cheng, An anisotropic constitutive model for single and polycrystalline materials. I – theorical developments, Int. J. Plasticity 12, pp. 147-162, 1996.

[KHA 1998] A.S. Khang and P. Cheng, An anisotropic constitutive model for single and polycristalline materials. II – experiments and predictions concerning thin-walled tubular OFHC cooper, Int. J. Plasticity 14, pp. 209-226, 1998.

[KNO 2001] R. Knockaert, Numerical and experimental study of the strain localization during sheet forming processes, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - CEMEF, 2001.

[KOC 1982] U.F. Kocks and H. Chandra, Slip geometry in partially constrained deformation, Acta Metall. 30, 695, 1982.

[KOC 1998] U.F. Kocks, C.N. Tomé and H.R. Wenk, Texture and anisotropy, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.

[KRO 1961] E. Kröner, Zur plastischen Verformung des Vielkristalls, Acta Metall. Mater. 9, pp. 155-161, 1961.

[LEB 1993] R.A. Lebensohn and C.N. Tomé, A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys, Acta Metall. Mater. 41, pp. 2611-2624, 1993.

[LEB 2001] R.A. Lebensohn, N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using fast fourier transform, Acta Materiala 49, pp. 2723-2737, 2001.

[LEB 2004] R.A Lebensohn, Y. Liu, P. Ponte Castaneda, On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals : comparaison with full field numerical simulations, Acta Materiala 52, pp. 5347-5367, 2004.

[LEB 2005] R.A. Lebensohn, C.N. Tomé and P. Ponte Castaneda, Improving the self-consistent prediction development of polycrystals incorporating intragranular field fluctuations, Proceedings of the 14th International Conference on Textures of Materials, July 11th-15th, 2005, Leuven, Belgium, 2005.

[LI 2003] S. Li, E. Hofferlin, A. Van Bael, P. Van Houtte, C. Teodosiu, Finite element modeling of plastic anisotropy induced by texture and strain-path changes, Int. J. Plasticity 19, pp. 647-674, 2003.

[LIA 1991] J. Lian and J. Cheng, Isotropic polycristal yield surfaces of BCC and FCC metals: crystallographic and continuum mechanics approaches. Acta Metall. Mater., 39, pp. 2285-2294, 1991.

[LIP 1990] P. Lipinski, J. Krier and M. Berveiller, Elastoplasticité des métaux en grandes déformations : comportement global et évolution de la structure interne, Rev. Phys. Appl. 25, pp. 361-388, 1990

[LIP 1992] P. Lipinski, A. Naddari and M. Berveiller, Recent results concerning the modeling of polycrystalline plasticity at large strains, Int. J. Solids Struct. 29, pp. 1873-1881, 1992.

[LOG 1999] R. Logé, Influence des conditions thermomécaniques et de la microstructure sur les évolutions de texture cristallographique du Zircaloy-4 en mise en forme à chaud, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - CEMEF, 1999.

[MAS 1998] R. Masson, Estimations non linéaires du comportement global de matériaux hétérogènes en formulation affine, application aux alliages de Zirconium, Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique, 1998.

[MAS 2000] R. Masson, M. Bornert, P. Suquet, A. Zaoui, An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals, J. Mech. Phys. Solids 48, pp. 1203-1227, 2000

[MIE 1999] C. Miehe, J. Schröder and J. Schotte, Computationnal homogeneization analysis in finite plasticity. Simulation of texture development in polycrystalline materials, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 171, pp. 347-418, 1999.

[MIK 1998] D.P. Mika and P.R. Dawson, Effects of grain interaction on deformation in polycrystals, Mat. Sci. and Eng. A 257, pp. 62-76, 1998

[MOL 1987] A. Molinari, G.R. Canova and S. Azhi, A self-consistent approach of the large deformation polycrystal viscoplasticity, Acta Metall. 35, pp. 2983-2994, 1987.

[MOL 1997] A. Molinari, R. Kouddane and S. Azhi, On the self-consistent modeling of elastic-plastic behavior of polycrystals, Mechanics of Materials 26, pp. 43-62, 1997.

[NAV 1996] P. Navidi, Y. Rougier and A. Zaoui, IUTAM Symposium on micromechanics of plasticity and damage of multiphase materials, pp. 123-130, Eds. A. Pineau and A. Zaoui, 1996.

[NEM 1986] S. Nemat-Nasser and M. Obata, Rate-dependent, Finite elasto-plastic deformation of polycrystals, Proc. Roy. Soc. London, A 407, pp. 343-375, 1986.

[NIN 1996] J. Ning and E.C. Aifantis, Anisotropic yield and plastic flow of polycristalline solids, Int. J. Plasticity 12, pp. 1221-1240, 1996.

[PON 1996] P. Ponte Castaneda, Exact second order estimates for the effective mechanical properties of non linear composite materials, J. Mech. Phys. Solids 44, pp. 827-862, 1996

[SAC 1928] G. Sachs, Zur Ableitung einer Fliessbedingung, Z. Ver. Deu. Ing. 72, pp. 734-736, 1928.

[SAR 1996] G.B. Sarma and P.R. Dawson, Effects of interactions among crystals on the inhomogeneous deformation of polycristals, Acta Mater. 44, pp. 1937-1953.

[SMI 1998] R.J.M. Smith, W.A.M. Brekelmans and H.E.M. Meijer, Prediction of the mechanical behavior of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modeling, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 155, pp. 181-192, 1998.

[SUQ 1995] P. Suquet, Overall potentials and extremal surface of power law or ideally plastic materials, J. Mech. Phys. Solids 41, pp. 981-1002, 1995.

[TAY 1938] G.I. Taylor, Plastic strain in metals, J. Inst. Metals 62, pp. 307-324, 1938.

[TEO 1995] C. Teodosiu and Z. Hu, Evolution of the intergranular microstructure at moderate and large strains : modeling and computationnal signifiance. In : S.F. Shen and P.R. Dawson (Eds.), Simulation of Materials Processing : Theory, Methods and Applications. Balkema, Rotterdam, pp. 173-182, 1995.

[TRE 1864] H. Tresca, Mémoire sur l'écoulement des corps soumis à de fortes pressions, Comptes Rendus Acad. Sci. Paris 59, pp. 754-758, 1864.

[VAN 1982] P. Van Houtte, On the equivalence of relaxed Taylor theory and the Bishop-Hill theory for partially constrained plastic deformation of crystals, Mater. Sci. Eng. 55, pp. 69-77, 1982.

[VAN 1989] P. Van Houtte, K. Mols, A.Van Bael and E. Aernoudt, Application of yield loci calculated from texture data, Textures and Microstructures 11, pp. 23-39, 1989.

[VAN 1994] P.Van Houtte, Application of plastic potentials to strain rate sensitive and insensitive anisotropic materials, Int. J. Plasticity, pp. 719-748, 1994.

[VAN 1999] P. Van Houtte, L. Delannay and I. Samajdar, Quantitative predictions of cold rolling textures in low-carbon steel by means of the LAMEL model, Textures et Microstructures 31, pp. 109-149, 1999.

[VAN 2002] P. Van Houtte, L. Delannay, S.R. Kalidindi, Comparison of two grain interaction models for polycrystal plasticity and deformation texture prediction, Int. J. Plasticity 18, pp. 359-377, 2002.

[VAN 2004] P. Van Houtte, S. Li and O. Engler, Taylor-Type Homogeneization Methods for Texture and Anisotropy, In : Continuum Scale Simulation of Engineering Materials, Eds D. Raabe, F. Roters, F. Barlat , L Chen, pp. 459-472, 2004.

[VAN 2005a] P. Van Houtte, S. Li, L. Delannay and M. Seefeldt, Deformation texture prediction : from the Taylor model to the Advanced Lamel Model, Int. J. Plasticity, 21, pp. 589-624, 2005.

[VAN 2005b] P. Van Houtte, A. Van Bael, M. Seefeldt and L. Delannay, The application of multiscale modelling for the prediction of plastic anisotropy and deformation textures, Proceedings of the 14th International Conference on Textures of Materials, July 11th-15th, 2005, Leuven, Belgium, 2005.

[VON 1913] R. Von Mises, Mechanik der festen Korper im plastich-deformablen Zustand, Nachr Konigl Ges Wiss Gottingen, Math Phys, pp. 582-592, 1913.

[WEN 1982] G.J. Weng, A unified self-consistent theory for the plastic-creep deformation of metals, J. Appl. Mech. 49, pp. 728-734, 1982.

[WIN 1996] J. Winters, Implementation of a texture-based yield locus into a elastoplastic finite element code. Application to metal forming, PhD Thesis, Katholieke Universiteit Leuven, Leuven (Belgium), 1996.

Chapitre III

La méthode des particules Lagrangiennes appliquée au suivi de données microstructurales

Sommaire

III.1 La méthode des particules Lagrangiennes : présentation bibliographique et historique …….. 33
III.1.1 La méthode P.I.C. (Particle In Cell) ……..….... 33
III.1.2 Les modèles particulaires : applications multiples ……..…….. 33
III.2 Nouvelle application de la méthode des particules Lagrangiennes : suivi de l'évolution de données microstructurales …….. 34
III.2.1 Problématique et stratégie proposée ……. 34
III.2.2 Principe général de la méthode basée sur le concept des particules Lagrangiennes 34
III.2.2.1 Les particules Lagrangiennes dans le maillage EF …….. 34
III.2.2.2 Notion de cellule de particule ...……... 34
III.2.2.3 Distribution des données microstructurales : notion de microstructures partielles ……. 36
III.2.2.4 Suivi de l'évolution des données microstructurales …… 36
III.2.3 Discussion concernant la distribution de la microstructure représentative …….. 36
III.2.3.1 Distribution dans les cellules ……... 37
III.2.3.2 Distribution sur les points d'intégration …….. 38
III.2.4 Intérêt de la méthode des particules Lagrangiennes ……. 39
III.2.4.1 Réduction du temps de calcul des simulations …… 39
III.2.4.2 Compatibilité avec le remaillage ……. 39
III.2.4.3 Possibilité d'intégrer des microstructures représentatives différentes ……. 40
III.3 Vers l'application de la méthode aux cas des modèles polycristallins : plan de l'étude ……... 40
Références bibliographiques……... 41

Dans ce chapitre, après une brève présentation bibliographique de la méthode des particules Lagrangiennes, nous présentons une nouvelle application de cette méthode : le suivi de données microstructurales lors de procédés de mise en forme. La mise en place de la méthode des particules Lagrangiennes dans ce nouveau contexte est exposée. Enfin, nous présentons son application dans le cadre de procédés de mise en forme simulés à l'aide d'une rhéologie anisotrope évolutive prédite par un modèle polycristallin.

III.1 La méthode des particules Lagrangiennes : présentation bibliographique et historique

III.1.1 La méthode PIC (Particle in Cell)

On utilise le terme de méthode PIC (Particle in Cell) lorsqu'un calcul (thermique, mécanique ou autre) se fait en utilisant des éléments finis, tandis que des particules transportent une partie de l'information. Ces particules sont souvent désignées sous le nom de **marqueurs**. Le mouvement des particules est a priori associé au champ de vitesse matériel du domaine étudié.

La méthode PIC a été introduite pour la première fois par Harlow, utilisant un maillage EF Eulérien [HAR 1964]. Harlow applique cette méthode avec un nombre constant de particules pour simuler le mélange de deux fluides de densités différentes. Au début du calcul, les particules sont réparties uniformément dans le domaine et une densité est affectée à chaque particule à partir de la densité de son élément d'appartenance. Après chaque calcul mécanique (réalisé sur le maillage fixe), la position des particules est réactualisée à partir du champ de vitesse. La moyenne de la densité des particules permet d'affecter une densité par élément afin de réaliser le calcul suivant.

Des particules Lagrangiennes peuvent aussi être utilisées pour le suivi d'un front de matière [ZAL 1999].

K. Traoré [TRA 2001] a mis en place dans le code EF de mise en forme Forge3® une méthode de transport particulaire dans le cas d'une formulation Arbitrairement Lagrangienne Eulérienne, pour le transport de la déformation généralisée lors de la simulation du procédé de laminage circulaire.

Dans le code EF Forge3®, des particules Lagrangiennes, communément désignées sous le nom de capteurs, ont été introduites afin de suivre l'évolution de grandeurs thermomécaniques telles que la vitesse de déformation ou la température, au niveau de différents points matériels. En effet, la formulation EF Forge3® étant une formulation de type Lagrangien Réactualisé, les particules Lagrangiennes se déplacent à la vitesse matérielle et suivent le maillage EF lors de la déformation.

Dans le cadre de notre étude, nous reprenons la philosophie de la méthode PIC. Nous donnons néanmoins au préalable un bref aperçu des modèles dits particulaires.

III.1.2 Les modèles particulaires : applications multiples

Nous définissons sous le terme générique de « modèles particulaires » la classe de modèles de simulation où la représentation discrète d'un système physique recourt à des particules interagissant les unes avec les autres. Dans le cadre de ces méthodes, contrairement à la méthode PIC, le calcul mécanique se fait sur les particules sans recours à un maillage.

Pour la présentation de ces méthodes, nous nous sommes largement inspirés de l'ouvrage de référence de Hockney et Eastwood [HOC 1988] et de la thèse de Karim Traoré [TRA 2001].

L'apparition des premiers modèles particulaires se situe dans les années 40 pour le traçage des mouvements d'électrons dans des magnétrons (Hartree et Buneman). Ensuite dans les années 60, ces méthodes sont appliquées lors de simulations monodimensionnelles en physique des plasmas sous l'impulsion de Buneman et Dawson. A partir de 1963, des études multidimensionnelles sont menées par Hockney et Buneman.

A la fin des années 70, un modèle hydrodynamique SPH (Smooth Particle Hydrodynamics) est développé par Lucy, Gingold et Monoghan. Au départ étudié pour l'astronomie et l'astrophysique, ce

modèle a été aussi appliqué à la résolution d'équations de conservation (Vila 1995) et a fortement gagné en popularité grâce à l'étude des impacts à haute vitesse. La méthode est également appliquée pour la propagation de fissures ou le déplacement d'une bulle dans un fluide. Cette méthode est aussi utilisée pour le calcul de l'évolution d'interfaces dans le cas d'écoulements multiphasiques [HIE 2005].

Dans le cas de simulations sans maillage, la RKPM (Reproducing Kernel Particle Method) est utilisée dans le cas de procédés de mise en forme [XIO 2005], plus précisément dans le cas d'un écoulement 2D pour des matériaux rigides-plastiques légèrement compressibles en grandes déformations. Les résultats en terme de profil et de niveau de contrainte sont analogues à ceux obtenus par la méthode EF. Le principal avantage de ce type de méthode est de permettre de grandes déformations sans utiliser le remaillage.

III.2 Nouvelle application de la méthode des particules Lagrangiennes : suivi de l'évolution de données microstructurales

III.2.1 Problématique et stratégie proposée

L'objectif de la thèse est de prendre en compte l'anisotropie mécanique induite par la microstructure des métaux dans le contexte des procédés de mise en forme. Pour cela, nous avons vu au chapitre précédent qu'il fallait suivre l'évolution d'une variable d'état, la texture cristallographique, au cours de la déformation. La problématique générale dans laquelle se situe la thèse est donc de mettre en place dans un code de calcul EF une méthode capable de suivre l'évolution des données microstructurales, la loi de comportement rhéologique utilisée étant liée à l'évolution de ces données microstructurales. De plus, cette méthode doit permettre d'effectuer des simulations de problèmes complets dans des temps de calcul raisonnables, tout en assurant une compatibilité avec le remaillage, souvent nécessaire dans les codes de calcul de mise en forme en grandes déformations utilisant une formulation Lagrangienne.

Pour répondre à cette problématique, nous avons choisi d'utiliser le concept des particules Lagrangiennes. Nous allons expliquer dans un premier temps le principe de la méthode. Nous verrons que cette méthode est compatible avec les techniques de remaillage utilisées. Enfin, nous exposerons le plan de notre étude concernant l'application de cette nouvelle méthode à la mise en forme de métaux polycristallins.

III.2.2 Principe général de la méthode basée sur le concept des particules Lagrangiennes

III.2.2.1 Les particules Lagrangiennes dans le maillage EF

Des particules Lagrangiennes sont positionnées dans le maillage EF. Ces particules sont représentées par des points dans le maillage EF et repérées par leurs 3 coordonnées spatiales (x,y,z) (Figure III.1). La formulation EF que nous étudions est une formulation Lagrangienne, les nœuds du maillage EF suivent donc l'écoulement de la matière. Au cours du calcul, la position d'une particule évolue à la vitesse matérielle du point correspondant à ses coordonnées (x,y,z). Les particules suivent donc également l'écoulement de la matière, ce qui justifie leur appellation de particules Lagrangiennes (Figure III.2).

III.2.2.2 Notion de cellule de particule

Dans le cadre de notre étude, les particules Lagrangiennes permettent de discrétiser le maillage en cellules. Nous définissons pour cela la notion de cellule de particule. La cellule d'une particule *p* est définie comme l'ensemble des points d'intégration du maillage qui sont plus proches de cette particule *p* que de toutes les autres. Le critère de proximité que nous utilisons est la distance euclidienne entre le point d'intégration et la position de la particule. En d'autres termes, les cellules sont des cellules de Voronoï centrées autour des particules comme illustré Figure III.1. Au cours de la

déformation, les particules Lagrangiennes bougeant avec le maillage (Figure III.2), les cellules évoluent mais restent des cellules de Voronoï. Dans le cas où il y a remaillage, les cellules doivent être reconstruites à l'aide des nouveaux points d'intégration du maillage EF. Si le maillage EF est suffisamment fin par rapport à l'espacement moyen entre particules Lagrangiennes, les cellules de Voronoï reconstruites après remaillage sont très proches, géométriquement, de celles qui existaient avant remaillage.

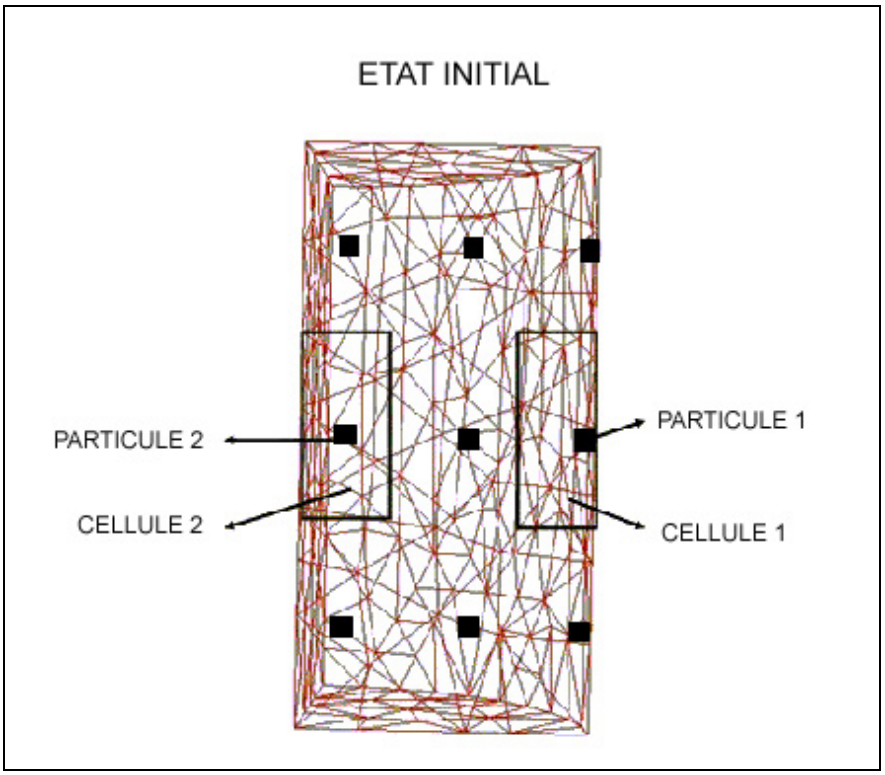


Figure III.1 *Illustration de la notion de particules Lagrangiennes et de cellules dans un maillage à l'état initial.*

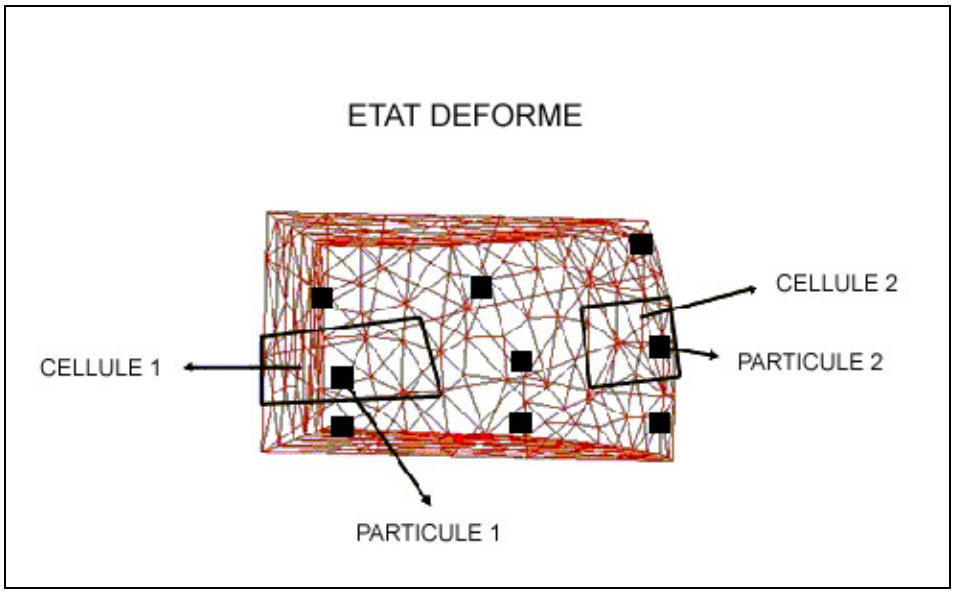


Figure III.2 *Illustration de la notion de particules Lagrangiennes et de cellules dans le maillage à l'état déformé (maillage de la Figure III.1 déformé) – Les particules Lagrangiennes suivent le maillage au cours de la déformation.*

III.2.2.3 Distribution des données microstructurales : notion de microstructures partielles

Pour suivre l'évolution des données microstructurales, nous utilisons une microstructure discrétisée représentative du matériau. Si le modèle rhéologique est de type polycristallin, la microstructure comprend au minimum la texture cristallographique, dont la version discrétisée est un ensemble d'orientations cristallographiques. La microstructure peut également inclure des tailles de grains ou encore des fractions de grains recristallisés.

Supposons que nous ayons une microstructure discrétisée représentative du matériau. A chaque cellule, nous attribuons cette microstructure discrétisée. Ensuite, dans chaque cellule, la microstructure discrétisée est distribuée sur les points d'intégration de la cellule. Au niveau de chaque point d'intégration du maillage EF, nous n'avons donc qu'une partie de la microstructure, que l'on appelle microstructure partielle.

Lorsque l'on regroupe les différentes microstructures associées aux points d'intégration de la cellule, nous obtenons la description complète de la microstructure représentative du matériau. La cellule devient donc en quelque sorte le volume représentatif de la microstructure. En résumé, cette méthode consiste donc, en un certain sens, en une représentation discrète de la microstructure distribuée dans chaque volume représentatif, matérialisé par une cellule de Voronoï autour des particules.

Néanmoins, il est possible de considérer d'autres volumes représentatifs que ceux associés aux cellules de Voronoï, par exemple à cheval sur deux ou plusieurs cellules, et de conserver statistiquement une représentation correcte de la microstructure du matériau. On peut aussi choisir de répartir la microstructure représentative sur plusieurs cellules, voire sur l'ensemble du maillage. Dans ce cas, les cellules ne sont plus systématiquement associées à des volumes représentatifs.

III.2.2.4 Suivi de l'évolution des données microstructurales

Les microstructures partielles, associées aux points d'intégration du maillage EF, évoluent localement en fonction des conditions thermiques et mécaniques calculées aux points d'intégration. Ainsi, dans une cellule, la microstructure représentative évolue en fonction des conditions mécaniques et thermiques aux différents points d'intégration de cette cellule.

Nous voyons donc, compte tenu du suivi de l'évolution microstructurale, qu'il va dans certains cas être nécessaire de positionner les particules de façon telle que chaque cellule définisse une zone suffisamment homogène en terme de sollicitations thermomécaniques, afin que l'évolution de la microstructure de la cellule soit correcte. Ce critère s'avérera important dans les cas de procédés de mise en forme où les deux conditions suivantes sont réunies (cf. chapitre VI) :

- remaillage,
- les microstructures évoluent très différemment selon les gradients de sollicitations imposées.

III.2.3 Discussion concernant la distribution de la microstructure représentative

Dans le cas où la microstructure est utilisée pour calculer le comportement thermomécanique du système étudié, il est important de tenir compte de l'influence respective de chaque variable microstructurale discrétisant la microstructure représentative. Cette influence est souvent modélisée par une fraction volumique, appelée « poids » de la variable microstructurale. Dans ce cas, il est nécessaire, lors de la distribution de microstructures partielles, que la somme des poids des variables attribuées à un point d'intégration soit proportionnelle au volume associé au point d'intégration.

Dans notre étude, nous avons uniquement considéré des microstructures représentatives discrétisées par des variables de même poids. Dans ce cas particulier, l'équation suivante (III.1) doit donc être vérifiée :

$$N_{tot}\frac{V_i}{V_{tot}} \cong N_i \quad \text{(III.1)}$$

avec

$$N_{tot} = M_{tot} N \quad \text{(III.2)}$$

où M_{tot} représente le nombre de microstructures représentatives dans le maillage, N le nombre de variables microstructurales constituant la microstructure représentative, N_{tot} le nombre de variables microstructurales dans le maillage, V_{tot} le volume total du maillage, V_i le volume associé au point d'intégration *i* et N_i le nombre de variables microstructurales à distribuer au point d'intégration *i*.
Dans l'équation (III.1), le membre de gauche est un réel alors que le membre de droite est un entier. En fonction de l' « arithmétique » des $\frac{V_i}{V_{tot}}$, il faudra donc distribuer un nombre M_{tot} suffisant de microstructures représentatives dans le maillage EF afin que $\frac{N_{tot}\frac{V_i}{V_{tot}}}{N_i}$ soit proche de l'unité. En d'autres termes, on souhaite :

$$\forall\, i,\quad \left| \frac{N_{tot}\frac{V_i}{V_{tot}}}{N_i} - 1 \right| < \varepsilon_1 \quad \text{(III.3)}$$

où ε_1 correpond à une tolérance donnée.

Variables de poids différents. Dans ce cas, on retrouve les équations (III.1), (III.2) en prenant pour N_{tot} la somme des poids des variables de la microstructure représentative et N_i la somme des poids des variables attribuées au point d'intégration *i*. Les poids étant des nombres réels positifs, le membre de droite de l'équation (III.1) est un réel, qui va dépendre de façon subtile du choix des variables attribuées à chaque point d'intégration. L'influence du critère (III.1) sur le nombre M_{tot} de microstructures représentatives à distribuer devient alors d'autant plus compliquée que l'arithmétique de l'ensemble des poids est complexe.

Dans le cas où des particules sont positionnées dans le maillage EF, on peut aussi vouloir attribuer un nombre entier de microstructures représentatives à chaque cellule, rajoutant ainsi de nouvelles contraintes relatives au respect du poids des variables microstructurales. Cette condition n'est pas forcément toujours strictement nécessaire dans une vision statistique (cf. section III.2.2.3) mais elle est tout de même conseillée, et utile en particulier lorsque l'on veut pouvoir récupérer une représentation complète de la microstructure associée à une position spatiale donnée (celle de la particule).

III.2.3.1 Distribution dans les cellules

Nous désignons par le terme « Volume de la cellule *cel* », noté V_{cel}, la somme des volumes associés aux points d'intégration de cette cellule. Le nombre total M_{tot} de microstructures à distribuer sur le maillage est relié au nombre M_{cel} de microstructures représentatives à distribuer dans la cellule *cel* comme suit :

$$M_{tot} = \sum_{cel=1,Nc} M_{cel} \quad \text{(III.4)}$$

où Nc représente le nombre de cellules (ou particules) dans le maillage.

Afin de respecter le poids des variables discrétisant la microstructure, nous devons distribuer un nombre entier M_{cel} de microstructures représentatives dans la cellule *cel* de façon que :

$$M_{tot}\frac{V_{cel}}{V_{tot}} \cong M_{cel} \quad \forall \quad cel \qquad \text{(III.5)}.$$

Dans l'équation (III.5), le membre de gauche est un réel alors que le membre de droite est un entier.

Nous devons donc trouver un entier M_{tot} tel que :

$$\forall cel, \quad \left| \frac{M_{tot}\frac{V_{cel}}{V_{tot}}}{M_{cel}} - 1 \right| < \varepsilon_2 \quad \text{(III.6)}$$

où ε_2 correspond à une tolérance donnée.

L' « arithmétique » de l'ensemble des $\frac{V_{cel}}{V_{tot}}$ peut nous forcer dans certains cas à prendre une valeur de M_{tot} grande pour que la relation ci-dessus reste valable $\forall cel$.

III.2.3.2 Distribution sur les points d'intégration

Le même problème que ci-dessus se pose pour déterminer le nombre de variables microstructurales à distribuer à chaque point d'intégration d'une cellule, à savoir que l'arithmétique des rapports entre les volumes associés aux points d'intégration dans une cellule peut nécessiter d'avoir là encore un grand nombre de variables à distribuer. En effet, nous devons dans ce cas respecter l'équation suivante (voir leurs équivalents III.1 et III.2 lorsqu'il n'y a qu'une seule cellule) :

$$N_{cel}\frac{V_i}{V_{cel}} \cong N_i \quad \forall cel, \forall i \in cel \quad \text{(III.7)}$$

où N_{cel} représente le nombre total de variables dans la cellule *cel* et est donc égal à :

$$N_{cel}=M_{cel}N \qquad \text{(III.8)}$$

où ***N*** représente le nombre de variables microstructurales constituant la microstructure représentative, *i* représente le numéro du point d'intégration, V_i son volume associé et N_i le nombre de données microstructurales à distribuer au point d'intégration *i*.
Nous devons donc trouver un entier N_{cel} tel que :

$$\forall i \in cel, \left| \frac{N_{cel}\frac{V_i}{V_{cel}}}{N_i} - 1 \right| < \varepsilon_3 \quad \text{(III.9)}$$

où ε_3 correspond à une tolérance donnée.

Lorsque les erreurs relatives ε_2, ε_3 dans les équations (III.6) et (III.9) sont petites, l'erreur relative ε_1 dans (III.3) est également petite, l'équation (III.1) étant le produit de (III.5) et (III.7).

Dans le cas où il y a peu de points d'intégration et un grand nombre de variables dans une microstructure, distribuer dans la cellule *cel* les variables des M_{cel} microstructures proportionnellement au volume, avec M_{cel} déterminé par les considérations de la sous-section III.2.3.1, génère des erreurs relatives petites.

Dans le cas où la cellule contient beaucoup de points d'intégration, il peut devenir nécessaire de multiplier M_{cel} par un entier pour avoir un nombre suffisant de variables dans une cellule donnée, sachant qu'alors il faudrait idéalement multiplier d'autant les M_{cel} des autres cellules, selon la précision sur les résultats désirée.

Respecter l'influence de chaque variable microstructurale sur le calcul du comportement thermomécanique peut donc nécessiter dans certains cas de considérer un grand nombre de microstructures, augmentant alors d'autant le temps de calcul. Ce problème peut notamment apparaître quand les cellules ainsi que les points d'intégration ont des volumes associés variables.

Dans la simulation des procédés de mise en forme, considérer des volumes de cellules et des volumes associés aux points d'intégration différents peut se produire dans les cas suivants :

- Nous pouvons vouloir positionner les particules dans le maillage non pas de façon uniforme mais de manière à ce que les cellules définies par ces particules correspondent à des zones bien particulières du maillage, comme par exemple, des zones où la déformation est relativement homogène. Une telle distribution des particules peut par exemple être obtenue en utilisant des méthodes de capteurs inverses, qui consistent à déterminer la position initiale des capteurs pour une position finale choisie. Dans ce genre de cas, la non-uniformité de la distribution des particules implique une non-uniformité des volumes de cellule.
- Dans le cas de pièces complexes, les tailles de maille sont généralement très variables. En effet, des boîtes de maillage peuvent être positionnées dans le maillage en fonction des différences géométriques entre les zones de la pièce et en fonction du procédé de déformation.

Nous verrons lors de notre étude concernant l'application de cette méthode aux modèles polycristallins que le nombre de microstructures à distribuer est inférieur au nombre de points d'intégration du maillage EF, ce qui permet donc de réduire le temps de calcul par rapport aux simulations jusqu'ici présentées dans la littérature [DAW 2003]. En effet, la stratégie utilisée dans ces simulations de procédés de mise en forme consiste à attribuer une microstructure représentative à chaque point d'intégration du maillage EF.

III.2.4 Intérêt de la méthode des particules Lagrangiennes

III.2.4.1 Réduction du temps de calcul des simulations

Le temps de calcul des simulations de procédés de mise en forme avec loi de comportement polycristalline est généralement proportionnel au nombre de variables microstructurales associées aux points d'intégration du maillage EF (cf. section IV.2.1.4). L'utilisation de la méthode des particules Lagrangiennes permet de réduire le nombre de variables microstructurales en chaque point d'intégration du maillage EF (microstructures partielles) et donc de diminuer le temps de calcul.

III.2.4.2 Compatibilité avec le remaillage

Le remaillage est souvent utilisé lors des simulations des procédés de mise en forme en grandes déformations. Il faut donc pouvoir transporter lors les données microstructurales du remaillage. Certaines de ces données, comme nous le verrons, ne peuvent pas être transportées à l'aide des méthodes classiques, comme par exemple le transport par défaut de Forge3® qui utilise des interpolations linéaires (cf. chapitre VI section VI.1). La méthode des particules Lagrangiennes permet le transport des données microstructurales dans la mesure où les données sont attachées à la particule et sont ainsi spatialement localisées. Lors du remaillage, les particules sont conservées et les cellules

correspondantes, reconstruites à l'aide du nouveau maillage EF, conservent leur localisation spatiale. On distribue alors aux nouveaux points du maillage EF les données microstructurales des cellules auxquelles ils appartiennent.

III.2.4.3 Possibilité d'intégrer des microstructures représentatives différentes

Lorsque l'on utilise la méthode des particules Lagrangiennes, nous pouvons modéliser le comportement d'un matériau dont la microstructure n'est pas homogène spatialement. Il suffit de distribuer à chaque particule la microstructure de la zone spatiale correspondante.

III.3 Vers l'application de la méthode aux cas des modèles polycristallins : plan de l'étude

Nous avons choisi de prédire l'anisotropie mécanique des métaux à l'aide de modèles polycristallins. La microstructure représentative du matériau dans le cas de ces modèles de comportement rhéologique anisotrope comporte au minimum la texture cristallographique. La texture cristallographique est, rappelons-le, généralement discrétisée à l'aide de 1000 orientations cristallographiques environ. Chaque orientation cristallographique est représentée sous la forme de 3 angles d'Euler et d'une fraction volumique. D'autres données microstructurales telles que les cissions critiques des systèmes de glissement et les contraintes cristallines dans le cas de modèles élasto-plastiques sont associées à chaque orientation cristallographique.

De manière générale, pour les modèles polycristallins, la microstructure discrétisée représentative est une liste de N variables vectorielles à n composantes, où N est le nombre d'orientations cristallographiques et n est le nombre de variables microstructurales attachées à chaque orientation cristallographique.

Lors de la mise en place de la méthode des particules Lagrangiennes pour le suivi de l'évolution de la texture cristallographique, nous allons discuter des différents points suivants :

- Comment prendre en compte l'évolution des données microstructurales dans un code de calcul EF utilisant une formulation Lagrangienne Réactualisée ?
- Comment calculer le nombre global de variables microstructurales nécessaires pour représenter correctement la microstructure ? Comment les distribuer spatialement ?
- Comment placer les particules dans le maillage ?
- Comment réduire le temps de calcul des simulations ?
- Comment transporter les variables microstructurales mais aussi comment calculer leur évolution lors des simulations en grandes déformations impliquant du remaillage automatique ?

Dans une première partie (chapitre IV), nous allons présenter la formulation EF utilisée et les différentes stratégies de couplage EF/ modèles polycristallins. Nous donnerons les équations du couplage. Les différentes stratégies de couplage seront validées dans le cas classique où une texture représentative est associée à chaque point d'intégration du maillage EF, ce qui, dans le cadre des particules Lagrangiennes, revient à considérer une particule positionnée à chaque point d'intégration du maillage.

Dans une deuxième partie (chapitre V), afin de mettre en évidence la nécessité de respecter la fraction volumique des orientations, nous comparons deux méthodes de distribution des orientations cristallographiques. Dans la première méthode, on distribue un même nombre d'orientations par point d'intégration du maillage EF sans tenir compte des volumes associés aux points d'intégration. La deuxième méthode tient compte des disparités de volume associées aux différents points d'intégration et correspond à la méthode proposée en section V.2 : nous proposons un algorithme de distribution des orientations cristallographiques qui permet de satisfaire les équations (III.6) et (III.9). Nous verrons que la distribution selon le volume est généralement préférable pour une bonne représentation de la

microstructure. Ensuite, nous analysons plus précisément cette méthode de distribution afin de déterminer le nombre de microstructures à distribuer dans différents cas de simulations plus complexes, en se restreignant au cas avec une seule particule avec une déformation hétérogène dans le maillage. Enfin, nous étudions un cas avec plusieurs particules positionnées dans le maillage EF afin de discuter de la nécessité de considérer une ou plusieurs particules dans le maillage EF lors de la simulation de procédés de mise en forme sans remaillage. A l'aide de cette étude, nous déduirons un critère qui permet de déterminer si le nombre de microstructures et le nombre de particules distribuées dans le maillage permettent d'obtenir une prédiction correcte de l'anisotropie mécanique.

Dans une troisième partie (chapitre VI), nous discutons tout d'abord du transport de variables tel qu'il est effectué dans le code EF Forge3®. Ensuite, après avoir analysé les raisons pour lesquelles ce transport classique dans Forge3® n'est pas envisageable dans le cas des données microstructurales, nous proposons différentes stratégies utilisant le concept des particules Lagrangiennes pour calculer l'évolution des variables microstructurales lors de simulations avec remaillage et discutons les différents avantages et inconvénients de ces stratégies.

En présence de remaillage, nous montrons à l'aide de différents cas de simulation la nécessité de considérer plusieurs particules. On montrera que les critères d'optimalité liés à la position des particules dépendent de la stratégie elle-même utilisée pour calculer l'évolution des variables microstructurales.

Nous étudierons l'influence du nombre de particules et du nombre de remaillages au cours de la simulation sur la prédiction de l'évolution de la texture et de l'anisotropie mécanique. Nous verrons qu'une seule des stratégies proposée est stable vis-à-vis du paramètre « nombre de remaillages ». Pour cette stratégie, nous étudierons ensuite l'influence de la taille de maille au cours du remaillage ainsi que l'influence du couplage utilisé sur la précision des résultats.

Enfin dans une dernière partie (chapitre VIII), la méthode des particules Lagrangiennes appliquée aux modèles polycristallins est confrontée aux expériences présentées au chapitre VII. Nous considérons la validation de la méthode sans remaillage à l'aide d'un essai de compression uniaxiale sur un matériau brut de solidification (URB66), qui présente une texture orientée dans la zone colonnaire de la brame de coulée (cf. chapitre VII). Ensuite, nous validons la méthode avec remaillage dans le cas d'un écrasement sur la génératrice de cylindre initialement texturé. Les résultats sont comparés pour deux nombres de particules différents (1 particule et 63 particules). L'ensemble des résultats sont analysés en termes de prédiction d'évolution de texture et d'anisotropie.

Références bibliographiques

[DAW 2003] P.R. Dawson, S.R. MacEwen and P-D. Wu, Advances in sheet metal forming analyses : dealing with mechanical anisotropy from crystallographic texture, International Material Reviews 48, N°2, pp. 86-122, 2003.

[HAR 1964] F.H. Harlow, The particle-in-cell computing method for fluid dynamics, Methods in Computationnal Physics, Fundamental Methods in Hydrodynamics, vol. 3, F.S. Adler A., Rotenberg M., Ed., Academic Press, New-York, 1964.

[HIE 2005] Simone E. Hieber and Petros Koumoutsakos, A Lagrangian particle set method, in Journal of Computationnal Physics 210, pp. 342-367, 2005.

[HOC 1988] R.W. Hockney and J.W. Eastwood, Computer Simulation using Particles, Institute of Physics Publishing, London, 1988.

[TRA 2001] K. Traoré, Simulation thermodynamique du laminage circulaire. Développement d'une formulation quasi-Eulérienne tridimensionnelle sur une architecture parallèle, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - CEMEF, 2001.

[XIO 2005] Shangwu Xiong, Wing Kam Liu, C.S. Li, J.M.C. Rodrigues and P.A.F. Martins, Simulation of bulk metal forming processes using the reproducing kernel particle method, Computers and Structures 83, pp. 574-587, 2005.

[ZAL 1999] S. Zaleski, Suivi d'interfaces, presented at Problèmes non linéaires appliqués, INRIA Rocquencourt, 1999.

Chapitre IV

Implémentation du couplage modèle EF Forge3® / rhéologie anisotrope pour la simulation des procédés de mise en forme sans remaillage

Sommaire

IV.1 Implémentation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin …… 45
IV.1.1 Présentation du code EF Forge3® ……... 45
IV.1.1.1 Formulation faible et discrétisation EF ……... 45
IV.1.1.2 Formulation grande déformation ……. 49
IV.1.2 Le modèle d'évolution microstructurale utilisé …… 50
IV.1.2.1 Formalisme mathématique pour la description de la déformation élasto-viscoplastique d'un cristal ……. 50
IV.1.2.2. Paramètres à identifier dans le modèle ……... 53
IV.1.3 Les différentes stratégies de couplage méthode EF/ modèle polycristallin ……. 55
IV.1.3.1 Principe général du couplage ……... 55
IV.1.3.2 Stratégies de couplage ……. 56
IV.1.4 Les équations de l'interface méthode EF / Modèle polycristallin élasto-viscoplastique …….. 57
IV.1.4.1 Stratégie de couplage fort …… 57
IV.1.4.2 Stratégie de couplage faible ……. 58
IV.2 Validation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin élasto-viscoplastique dans le cas où une particule Lagrangienne est positionnée au centre de gravité de chaque EF …... 59
IV.2.1 Validation de la stratégie de couplage fort ……... 59
IV.2.1.1 Présentation des simulations …… 59
IV.2.1.2 Résultats en terme de prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture …… 61
IV.2.1.3 Conclusion ……... 63
IV.2.1.4 Etude complémentaire : Temps de calcul des simulations en fonction du nombre d'EFs dans le maillage et du nombre d'orientations cristallographiques …. 63
IV.2.2 Validation de la stratégie de couplage faible …… 65
IV.2.2.1 Présentation des simulations …… 65
IV.2.2.2 Résultats des simulations ……. 66
IV.2.2.2.1 Temps de calcul des simulations …… 66
IV.2.2.2.2 Prédiction d'anisotropie et évolution de texture ……. 66
IV.2.2.3. Conclusion …….. 71
Conclusion …… 71
Références bibliographiques …….. 71

Dans ce chapitre, nous présentons le couplage modèle EF Forge3® / rhéologie anisotrope ainsi que sa validation numérique. Nous utilisons la méthode classique de couplage modèle polycristallin/EF qui consiste à placer une texture cristallographique initiale à chaque point d'intégration du maillage EF [DAW 2003]. Dans le cadre du concept des particules Lagrangiennes exposé au chapitre III, cette stratégie revient à positionner une particule Lagrangienne à chaque point d'intégration du maillage EF.

Dans la première partie, nous présentons le code EF Forge3® ainsi que le modèle polycristallin que nous avons choisi d'utiliser. Il s'agit d'un modèle de Taylor élasto-viscoplastique [DEL 2005]. Nous discutons aussi des différentes stratégies de couplage possibles entre le code EF et le modèle polycristallin : le couplage fort et le couplage faible. Enfin, les équations constituant l'interface entre la méthode EF et le modèle polycristallin sont présentées pour les deux stratégies de couplage.

Dans la seconde partie, nous validons l'implémentation numérique des deux stratégies de couplage proposées.

IV.1 Implémentation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin

IV.1.1 Présentation du code EF Forge3®

Le logiciel éléments finis Forge3® est développé depuis plusieurs années au Centre de mise en forme de l'Ecole des Mines de Paris à Sophia-Antipolis (CEMEF). Initialement, le comportement viscoplastique a été implémenté pour les opérations de forgeage à chaud. La version élasto-plastique est apparue plus tard et beaucoup de développements proviennent du travail de C. Aliaga [ALI 2000]. Nous présentons ici la formulation faible des équations.

IV.1.1.1 Formulation faible et discrétisation EF

Formulation faible

Le logiciel EF Forge3® est basé sur une formulation faible mixte en vitesse-pression. Les équations de base correspondent à l'équation d'équilibre de la mécanique et l'évolution de la pression. Pour simplifier la présentation, les forces de volume, d'inertie (hypothèses classiques dans le cadre du forgeage à chaud [PER 2000]) et les effets thermiques sont négligés :

$$\begin{cases} div(\sigma) = 0 \Rightarrow div(s) - \nabla p = 0 \\ tr(\dot{\varepsilon}) + \dfrac{\dot{p}}{\chi} = 0 \end{cases} \qquad (\text{IV.1})$$

où σ et s représentent les tenseurs de contrainte et de contrainte déviatorique de Cauchy, p est la pression, le . désigne la dérivée temporelle et χ est le coefficient de compressibilité du matériau. Le tenseur de contrainte est écrit comme une fonction du tenseur vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$, qui est lui-même relié au tenseur gradient de vitesse par la relation (IV.2).

$$\dot{\varepsilon} = \frac{1}{2}\left(\nabla\vec{v} + \nabla\vec{v}^{T}\right) \qquad (\text{IV.2})$$

Le problème à résoudre est donc : trouver $(\vec{v}, p) \in V \times P$ tel que :

$$\begin{cases} div(s(\vec{v})) - \nabla p = 0 \\ tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v})) + \dfrac{\dot{p}}{\chi} = 0 \end{cases} \qquad \text{(IV.3)}$$

dans le domaine Ω. $V=(H^1(\Omega))^3$ est l'espace de Sobolev des champs cinématiquement admissibles et $P=L^2(\Omega)$ est l'espace de Lebesgue des fonctions de carré sommable sur Ω.

Ce problème est transformé en une formulation faible en multipliant les deux équations par des fonctions admissibles $\vec{v}^*$ et p^* et en intégrant sur le domaine Ω. En utilisant le théorème de Green, le problème (IV.3) devient :

trouver $(\vec{v}, p) \in V \times P$ tel que :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_\Omega s(\vec{v}) : \dot{\varepsilon}(\vec{v}^*) d\Omega - \int_\Omega p tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}^*)) d\Omega - \int_{\partial\Omega} \vec{T}.\vec{v}^* dS = 0 \quad \forall \vec{v}^* \in V \\ \displaystyle\int_\Omega p^* \left[tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v})) + \frac{\dot{p}}{\chi} \right] d\Omega = 0 \quad \forall p^* \in P \end{cases} \qquad \text{(IV.4)}$$

où $\vec{T}$ est le vecteur densité de force surfacique s'exerçant sur la frontière de Ω (conditions aux limites).

Discrétisation EF

La discrétisation EF consiste à diviser le domaine Ω en sous-domaines Ω_e. $\vec{v}_e$ et p_e sont les solutions dans un élément donné et $V_e \times P_e$ est l'ensemble des solutions admissibles sur un élément. Les équations se réécrivent de la manière suivante :

$$\begin{cases} \displaystyle\sum_{\Omega_e} \int_{\Omega_e} s(\vec{v}_e) : \dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^*) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} p_e tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^*)) d\Omega_e - \int_{\partial\Omega_e} \vec{T}.\vec{v}_e^* dS = 0 \quad \forall \vec{v}_e^* \in V_e \\ \displaystyle\sum_{\Omega_e} \int_{\Omega_e} p_e^* \left[tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}_e)) + \frac{\dot{p}_e}{\chi} \right] d\Omega_e = 0 \quad \forall p_e^* \in P_e \end{cases} \qquad \text{(IV.5)}$$

En pratique, les solutions $\vec{v}_e$ et p_e sont générées par un nombre fini de fonctions de base définies sur Ω_e.

Choix de la fonction d'interpolation

Un premier problème est le choix de la fonction d'interpolation pour la vitesse et la pression pour respecter la fermeture du problème. L'élément fini P1+/P1 utilisé dans Forge3® est appelé « mini-élément ». Il est constitué tout d'abord d'un élément tétraédrique P1 à 4 nœuds avec une interpolation linéaire en vitesse et pression. Un 5ème nœud est ajouté au centre du tétraèdre pour enrichir l'interpolation du champ de vitesse par une composante, appelée champ bulle, linéaire sur chaque sous-tétraèdre formé par le nœud central et trois autres nœuds. Ce nouvel élément tétraédrique à 5 nœuds, ainsi défini, est appelé l'élément P1+. Le mini-élément est illustré Figure IV.1.

Le champ de vitesse est décrit par deux composantes, le champ linéaire et le champ bulle :

$$\vec{v}_e = \vec{v}_e^{\,l} + \vec{b}_e \qquad \text{(IV.6)}$$

Les composantes de la vitesse et de la pression sont donc interpolées comme suit :

$$\begin{aligned} v_e^i(x) &= N_k(x) v_k^i + B(x) b^i \quad k = 1..4, i = 1..3 \\ p_e(x) &= N_k(x) p_k \qquad\qquad k = 1..4 \end{aligned} \qquad \text{(IV.7)}$$

où N_k sont les fonctions d'interpolation des champs linéaires vitesse et pression, *B* la fonction bulle, v_k et p_k les valeurs de vitesse et de pression nodales, *b* la valeur nodale associée au nœud central.

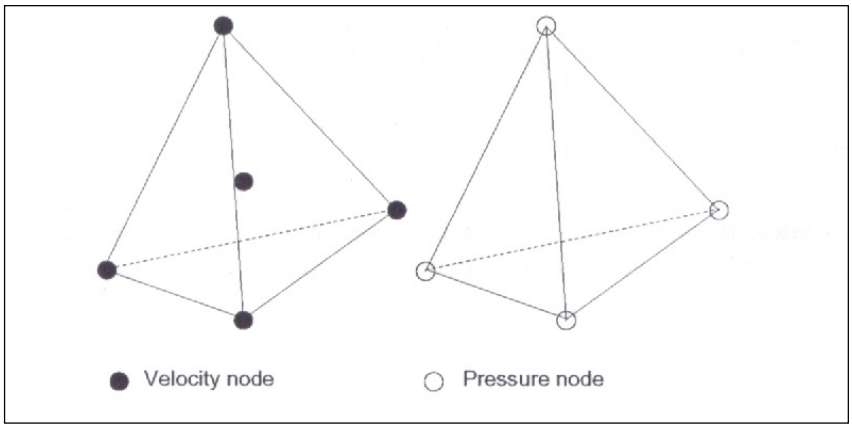


Figure IV.1 *P1+/P1 mini-élément*

Soit $\dot{\lambda}$ le multiplicateur plastique défini par $\dot{\varepsilon}^p = \dot{\lambda}\dfrac{\partial f}{\partial \sigma}$ où f est la surface limite d'élasticité ou surface de charge plastique. Selon Aliaga [ALI 2000], dans le cas de la formulation faible, le multiplicateur plastique $\dot{\lambda}$ peut être écrit comme une fonction du champ de vitesse linéaire uniquement. La contrainte déviatorique peut ainsi être séparée en deux composantes comme indiqué ci-après :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} s(\vec{v}_e) : \dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^{\,*}) d\Omega_e &= \int_{\Omega_e} s(\dot{\lambda}(\vec{v}_e^{\,l}), \vec{v}_e) : \dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^{\,*}) d\Omega_e \\ &= \int_{\Omega_e} (s^l(\dot{\lambda}(\vec{v}_e^{\,l}), \vec{v}_e^{\,l}) + s^b(\dot{\lambda}(\vec{v}_e^{\,l}), \vec{b}_e)) : \dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^{\,*}) d\Omega_e \qquad \text{(IV.8)} \\ &= \int_{\Omega_e} (s^l + s^b) : \dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^{\,*}) d\Omega_e \end{aligned}$$

Considérons que la fonction test pour la vitesse est donnée comme la somme d'un champ linéaire et d'un champ bulle : $\vec{v}^{\,*} = \vec{v}^{\,l*} + \vec{b}^{\,*}$, le système d'équations (IV.5) se réécrit :

$$\begin{cases} \int_{\Omega_e} s(\vec{v}_e) : \dot{\varepsilon}(\vec{v}^{l*}) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} p_e tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}^{l*})) d\Omega_e - \int_{\partial\Omega_e} \vec{T}.\vec{v}^{l*} dS = 0 \quad \forall \vec{v}^{l*} \in V_e^l \\ \int_{\Omega_e} s(\vec{v}_e) : \dot{\varepsilon}(\vec{b}^*) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} p_e tr(\dot{\varepsilon}(\vec{b}^*)) d\Omega_e - \int_{\partial\Omega_e} \vec{T}.\vec{b}^* dS = 0 \quad \forall \vec{b}^* \in V_e^b \\ \int_{\Omega_e} p_e^* \left[tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^l + \vec{b}_e^l)) + \frac{\dot{p}_e}{\chi} \right] d\Omega_e = 0 \quad \forall p_e^* \in P_e \end{cases} \qquad (IV.9)$$

En utilisant, la décomposition de la contrainte (IV.8), le système (IV.9) se réécrit :

$$\begin{cases} \int_{\Omega_e} (s^l + s^b) : \dot{\varepsilon}(\vec{v}^{l*}) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} p_e tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}^{l*})) d\Omega_e - \int_{\partial\Omega_e} \vec{T}.\vec{v}^{l*} dS = 0 \quad \forall \vec{v}^{l*} \in V_e^l \\ \int_{\Omega_e} (s^l + s^b) : \dot{\varepsilon}(\vec{b}^*) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} p_e tr(\dot{\varepsilon}(\vec{b}^*)) d\Omega_e - \int_{\partial\Omega_e} \vec{T}.\vec{b}^* dS = 0 \quad \forall \vec{b}^* \in V_e^b \\ \int_{\Omega_e} p_e^* \left[tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^l + \vec{b}_e^l)) + \frac{\dot{p}_e}{\chi} \right] d\Omega_e = 0 \quad \forall p_e^* \in P_e \end{cases} \qquad (IV.10)$$

Le système d'équations peut être simplifié en utilisant les propriétés du champ bulle démontré dans [ALI 2000] qui sont :

$$\int_{\Omega_e} s^l : \dot{\varepsilon}(\vec{b}^*) d\Omega_e = \int_{\Omega_e} s^b : \dot{\varepsilon}(\vec{v}^{l*}) d\Omega_e = 0 \qquad (IV.11)$$

Le système d'équations (IV.5) s'écrit finalement :

$$\begin{cases} \int_{\Omega_e} s^l : \dot{\varepsilon}(\vec{v}^{l*}) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} p_e tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}^{l*})) d\Omega_e - \int_{\partial\Omega_e} \vec{T}.\vec{v}^{l*} dS = 0 \quad \forall \vec{v}^{l*} \in V_e^l \\ \int_{\Omega_e} s^b : \dot{\varepsilon}(\vec{b}^*) d\Omega_e - \int_{\Omega_e} p_e tr(\dot{\varepsilon}(\vec{b}^*)) d\Omega_e - \int_{\partial\Omega_e} \vec{T}.\vec{b}^* dS = 0 \quad \forall \vec{b}^* \in V_e^b \\ \int_{\Omega_e} p_e^* \left[tr(\dot{\varepsilon}(\vec{v}_e^l + \vec{b}_e^l)) + \frac{\dot{p}_e}{\chi} \right] d\Omega_e = 0 \quad \forall p_e^* \in P_e \end{cases} \qquad (IV.12)$$

Le système obtenu devient un système découplé en $\vec{v}_e^{\,l}$ et $\vec{b}$.

Résolution du système(IV.12)

Les équations (IV.12) sont résolues à l'aide d'une procédure itérative de type Newton-Raphson, qui mène, pour chaque itération de Newton-Raphson, à la résolution d'un système d'équations linéaires où les inconnues incrémentales sont la vitesse linéaire, la vitesse bulle et la pression :

$$\begin{bmatrix} K_e^{vv} & 0 & K_e^{vp} \\ 0 & K_e^{bb} & K_e^{bp} \\ {}^t K_e^{vp} & {}^t K_e^{bp} & K_e^{pp} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\vec{v} \\ \Delta\vec{b} \\ \Delta\vec{p} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_e^v \\ R_e^b \\ R_e^p \end{pmatrix} \qquad (\text{IV.13})$$

où $\Delta\vec{v}$, $\Delta\vec{b}$ et $\Delta\vec{p}$ sont les vecteurs des inconnues nodales Δv_k^i, Δb^i et Δp_k (k = 1..4, i = 1..3) pour l'élément e, comme définies équations (IV.7).

Module tangent et module tangent bulle

Pour construire ce système d'équations, il faut calculer les dérivées de la contrainte déviatorique par rapport à l'incrément de déformation :

$$C^l = \frac{\partial s^l}{\partial \Delta\varepsilon(\vec{v}_e^{\,l})}$$

$$C^b = \frac{\partial s^b}{\partial \Delta\varepsilon(\vec{b}_e)} \qquad (\text{IV.14})$$

Ces termes sont appelés module tangent et module tangent bulle.
Par une technique de condensation locale [ALI 2000], les inconnues bulle b^i peuvent être éliminées et le système linéaire à résoudre est le suivant :

$$\begin{bmatrix} K_e^{vv} & K_e^{vp} \\ {}^t K_e^{vp} & \overline{K}_e^{pp} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\vec{v} \\ \Delta\vec{p} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} R_e^v \\ \overline{R}_e^p \end{pmatrix} \qquad (\text{IV.15})$$

où les termes $\overline{K}_e^{pp}$ et $\overline{R}_e^p$ contiennent les contributions des termes de la bulle.

IV.1.1.2 Formulation grande déformation

Le code EF Forge3® utilise un schéma de type Lagrangien réactualisé. Le changement total de la configuration est divisé en petits incréments de déformation. Chacun de ces incréments correspond à une petite quantité de déformation. La vitesse et la pression sont calculées sous les hypothèses de petite déformation sur la configuration courante. Le champ de vitesse est utilisé pour actualiser la configuration :

$$\vec{X}(t+\Delta t) = \vec{X}(t) + \vec{V}(t)\Delta t \qquad (\text{IV.16})$$

où $\vec{V}(t)$ est le champ de vitesse calculé sur la configuration $\vec{X}(t)$. Ce principe est illustré Figure IV.2.

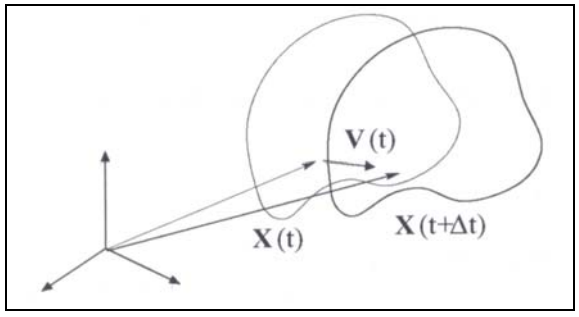


Figure IV.2 *Méthode de Lagrangien réactualisé*

En pratique, le pas de temps est limité pour que les incréments de déformation restent petits.

Nous n'en dirons pas plus quant à la présentation du logiciel EF Forge3®. Pour plus de détails à ce sujet, le lecteur pourra se référer à [BOY 1999], [ALI 2000].

IV.1.2 Le modèle d'évolution microstructurale utilisé

Le modèle d'évolution microstructurale que nous avons choisi d'utiliser afin de prédire l'anisotropie de comportement mécanique induite par la microstructure du métal est un modèle polycristallin élasto-viscoplastique de type Taylor ([DEL 2005], [DEL 2006]) .

Ce modèle polycristallin est valide pour les métaux à condition que la déformation plastique soit accommodée par le glissement des dislocations. Le maclage n'est pas pris en compte car il nécessite des développements spécifiques [KAL 2001]. Pour la présentation du modèle, nous restreignons l'analyse à de petites déformations élastiques et de petits incréments de déformation.

IV.1.2.1 Formalisme mathématique pour la description de la déformation élasto-viscoplastique d'un cristal

Les données d'entrée du modèle polycristallin élasto-viscoplastique sont :

- le gradient de déformation pour le volume du polycristal,
- le nombre d'incréments de déformation,
- le pas de temps à chaque incrément de déformation,
- les données matériaux que nous présentons en section IV.1.2.2.

Théorie générale de la plasticité cristalline

Les observations expérimentales sous-jacentes à la théorie de la plasticité cristalline peuvent être résumées comme suit [GIL 1980]. Le glissement des dislocations est un phénomène qui intervient selon des directions et des plans cristallographiques bien spécifiques. Tandis que les dislocations « traversent » le réseau cristallin, le matériau est cisaillé, le volume du matériau reste constant et le réseau cristallin n'est globalement pas affecté. Les déformations du réseau sont élastiques et leur amplitude est plus faible que celle des déformations plastiques. De plus, le réseau cristallin tourne pour compenser les contraintes cinématiques locales.

Ces observations ont aidé les modélisateurs à distinguer les déformations plastiques et les déformations élastiques. Pour ce faire, ils se sont basés sur une décomposition multiplicative du tenseur gradient de déformation F qui peut s'écrire de la façon suivante :

$$F = F^{el} F^{p} = R^{*} U^{el} F^{p} \qquad \text{(IV.17).}$$

Dans cette expression, F^{p} transforme la configuration initiale en une configuration fictive intermédiaire correspondant au cristal déformé seulement par le glissement des dislocations (Figure IV.3). La transformation F^{el} peut être décomposée en un tenseur symétrique U^{el} représentant la déformation élastique et un tenseur orthogonal R^{*} représentant la rotation du réseau.

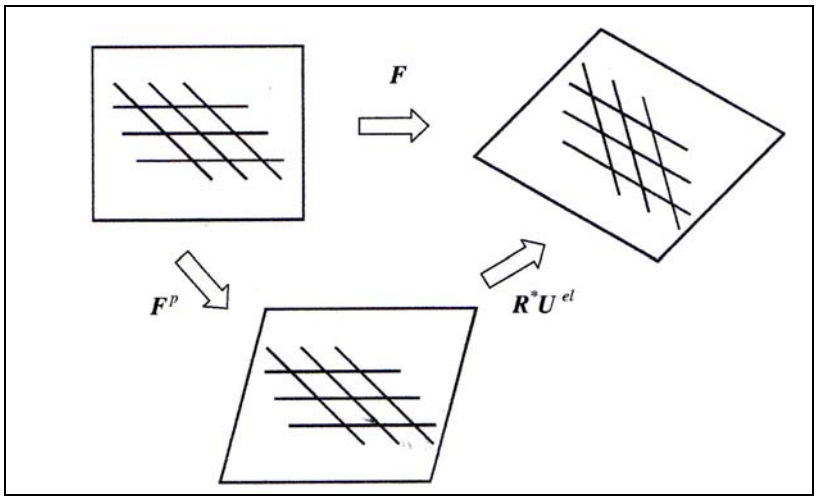


Figure IV.3 *Schéma de la configuration fictive intermédiaire utilisée lors de la modélisation de la plasticité cristalline* [DEL 2006].

En utilisant un point pour indiquer la dérivation par rapport au temps, le tenseur gradient de vitesse *L* s'écrit sous la forme :

$$L=\dot{F}F^{-1}=\dot{R}^{*}R^{*T}+R^{*}\left(\dot{U}^{el}U^{el^{-1}}\right)R^{*T}+R^{*}U^{el}\left(\dot{F}^{p}F^{p^{-1}}\right)U^{el^{-1}}R^{*T} \qquad (\text{IV.18})$$

Dans l'équation (IV.19), le tenseur gradient de vitesse plastique L^{p} est calculé comme la somme des taux de cisaillement sur les systèmes de glissement indexés avec le symbole α. Le tenseur de Schmid M^{α} est le produit tensoriel de la normale au plan de glissement n^{α} avec la direction de glissement b^{α} :

$$L^{p}=\dot{F}^{p}F^{p^{-1}}=\sum_{\alpha}M^{\alpha}\dot{\gamma}^{\alpha} \quad (\text{IV.19}).$$

Comme un glissement cristallographique ne distort pas le réseau, M^{α} a la même expression dans la configuration initiale et dans la configuration intermédiaire. Le tenseur de déformation élastique *E* peut être calculé par rapport à la configuration intermédiaire, plutôt que par rapport à la configuration initiale :

$$E=\frac{1}{2}\left(F^{el^{T}}F^{el}-1\right)=\frac{1}{2}\left(U^{el^{T}}U^{el}-1\right) \qquad (\text{IV.20}).$$

La contrainte de Piola-Kirchhoff T est reliée à la contrainte de Cauchy σ par la relation :

$$T=\det(F^{el})F^{el^{-1}}\sigma F^{el^{-T}}=\det(U^{el})U^{el^{-1}}R^{*^{T}}\sigma R^{*}U^{el^{-1}} \quad (\text{IV.21}).$$

L'opérateur d'élasticité du 4ème ordre C traduit la proportionnalité de T par rapport à E :

$$T=CE \qquad (\text{IV.22}).$$

La théorie de la plasticité cristalline est complétée en reliant les taux de glissement $\dot{\gamma}^{\alpha}$ à la contrainte *T*. La loi de Schmid généralisée traduit cette relation, en rendant compte du fait que le glissement intervient uniquement si la cission critique résolue, $\tau^{\alpha}=T:M^{\alpha}$ atteint une valeur critique.

Pour pallier l'ambiguité de la détermination des taux de glissement [VAN 1988], l'expression viscoplastique introduite par Hutchinson en 1977 [HUT 1977] est adoptée :

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{T : M^{\alpha}}{\tau_c} \right)^n sign(\tau^{\alpha}) \qquad (\text{IV.23})$$

où le taux de glissement de référence $\dot{\gamma}_0$ et le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation *n* sont gardés constants alors que la contrainte de cisaillement critique résolue τ_c^{α} augmente avec la déformation du fait de l'écrouissage, et proportionnellement au glissement cumulé des dislocations. La loi d'écrouissage utilisée dans ce modèle suppose que τ_c est identique sur tous les systèmes de glissement et s'exprime comme suit :

$$\dot{\tau}_c^{\alpha} = H_0^{\alpha} \left(\frac{\tau_{sat}^{\alpha} - \tau_c^{\alpha}}{\tau_{sat}^{\alpha} - \tau_0^{\alpha}} \right) \sum_{\beta} \left| \dot{\gamma}^{\beta} \right| \qquad (\text{IV.24})$$

où τ_0^{α} et τ_{sat}^{α} représentent les valeurs de τ_c^{α} initiale et à saturation, H_0^{α} étant le coefficient d'écrouissage.

Simplification de la loi constitutive en supposant des déformations élastiques infinitésimales

Dans les procédés de mise en forme des métaux, les déformations élastiques n'excèdent jamais 1%, il a donc été choisi de les considérer comme des quantités infinitésimales. A l'aide de cette approximation, le tenseur de déformation élastique peut être remplacé par $(I+\varepsilon^{el})$ où I représente le tenseur identité du second ordre et ε^{el} est un tenseur symétrique tel que $\|\varepsilon^{el}\| \langle\langle 1$, ce qui mène aux équations :

$$(U^{el})^{-1} = (I+\varepsilon^{el})^{-1} = (1-\varepsilon^{el}) \qquad (\text{IV.25})$$

$$\det(U^{el}) = \det(I+\varepsilon^{el}) = 1+trace(\varepsilon^{el}) \qquad (\text{IV.26}).$$

Dans le modèle, l'approximation est faite à un ordre supérieur : pour tout tenseur X, $\varepsilon^{el}:X$ est négligé par rapport à X. L'équation (IV.18) se réécrit donc :

$$L = \dot{F}F^{-1} = \dot{R}^{*}R^{*T} + R^{*}\left(\dot{\varepsilon}^{el} + L^{p}\right)R^{*T} \qquad (\text{IV.27}),$$

alors que les équations (IV.20) et (IV.22) mènent à :

$$T = C\varepsilon^{el} = R^{*T}\sigma R^{*} \qquad (\text{IV.28}).$$

Implémentation de la loi de comportement du matériau

En vue de son intégration dans une formulation Eléments Finis, la loi de comportement du matériau est utilisée avec une intégration en temps implicite et en supposant que les incréments de rotation de corps rigide précèdent les incréments de déformation correspondants.

Notons $\widetilde{R}^*$ l'estimation de $R^*\big|_{t+\Delta t}$ calculée en négligeant dans (IV.27) le terme dépendant du glissement des dislocations ($R^*\left(\dot{\varepsilon}^{el}+L^p\right)R^{*T}$) et en intégrant le reste à l'aide d'une carte exponentielle [SIM 1998]. L'incrément de déformation est exprimé en utilisant la partie symétrique de l'équation (IV.27) :

$$\Delta D = \widetilde{R}^*\left(\dot{\varepsilon}^{el}+\frac{1}{2}\left(L^p+L^{pT}\right)\right)\widetilde{R}^{*T}\Delta t \qquad (\text{IV.29}).$$

En substituant les équations (IV.29) et (IV.19) dans (IV.28), les six composantes du tenseur des contraintes $T\big|_{t+\Delta t}$ sont solution de l'équation non linéaire suivante :

$$T\big|_{t+\Delta t} = T\big|_t + C\left[\widetilde{R}^{*T}\Delta D\widetilde{R}^* - \frac{1}{2}\sum_\alpha\left(M^\alpha+M^\alpha\right)^T\Delta\gamma^\alpha\right] \quad (\text{IV.30})$$

où les variables $\Delta\gamma^\alpha$ sont déterminées par une intégration implicite de (IV.23) et les $\tau_c\big|_{t+\Delta t}$ résultent de l'intégration de (IV.24).

L'équation non linéaire (IV.30) est résolue en utilisant l'estimation de $R^*\big|_{t+\Delta t}$ à l'aide d'un algorithme de Newton-Raphson, et les vitesses de glissement sont calculées complémentairement ((IV.23) et (IV.24)). La rotation exacte du réseau $R^*\big|_{t+\Delta t}$ est ensuite calculée en utilisant l'équation complète (IV.27). Cette nouvelle valeur de $R^*\big|_{t+\Delta t}$ sert à exprimer le tenseur de contrainte dans le repère de référence de l'échantillon (équation (IV.28)) et est enregistrée pour le prochain incrément de temps.

Nous avons ici exposé le formalisme mathématique du modèle dans le cas d'un mono-cristal. Pour passer à l'échelle du polycristal, la méthode d'homogénéisation associée au modèle élasto-viscoplastique de L. Delannay est une méthode d'homogénéisation de type Taylor qui peut se formaliser de la manière suivante :

$$\boldsymbol{E}=\varepsilon_c \quad \forall\ c \qquad (\text{IV.31})$$

$$\Sigma=\langle\sigma_c\rangle \qquad (\text{IV.32})$$

où E, Σ représentent la déformation macroscopique et la contrainte macroscopique, c'est-à-dire à l'échelle du polycristal,

ε_c , σ_c la déformation et la contrainte microscopiques du cristal c,

< > l'opération de moyenne sur l'ensemble des cristaux utilisés pour représenter le polycristal.

L'équation (IV.31) traduit l'hypothèse de Taylor alors que l'équation (IV.32) représente l'étape d'homogénéisation.

IV.1.2.2. Paramètres à identifier dans le modèle

Texture initiale

La texture initiale est prise en compte par un ensemble discret d'orientations cristallographiques et la fraction volumique de chacune des orientations.

Chaque orientation cristallographique est décrite sous la forme d'angles d'Euler ($\varphi_2, \phi, \varphi_1$) avec la convention de Bunge [BUN 82]. Les 3 angles d'Euler représentent les 3 rotations successives

qu'il faut opérer sur le repère du cristal considéré pour aboutir à son orientation, en démarrant à partir du repère de l'échantillon. Les rotations successives sont illustrées Figure IV.4, les axes du cristal sont indexés par *c* et ceux de l'échantillon par *s*. La texture initiale du polycristal peut être déterminée à l'aide de différentes techniques de mesure expérimentales comme par exemple la diffraction des RX ou la technique Electron Back Scattered Diffraction (EBSD). Cette dernière technique expérimentale est présentée au chapitre VII section VII.1.1.1.2.

La fraction volumique associée à chacune des orientations cristallographiques est supposée la même et prise égale à 1. Cette hypothèse implique que chaque orientation a le même poids dans le calcul du comportement mécanique du polycristal.

La cission critique résolue

La cission critique τ_c est reliée à la contrainte d'écoulement σ par la relation $\sigma=M\tau_c$ où M est le facteur de Taylor moyen qui dépend de l'orientation cristallographique de chaque cristal. Lorsque la texture du matériau n'est pas aléatoire, le facteur de Taylor moyen peut être calculé en faisant la moyenne des facteurs de Taylor de chacun des grains mais, bien souvent en pratique, pour des structures cubiques faces centrées, la cission critique résolue τ_c est prise égale au tiers de la contrainte d'écoulement. En effet, le facteur de Taylor moyen est égal à 3 pour des matériaux cubiques faces centrées à texture cristallographique aléatoire.

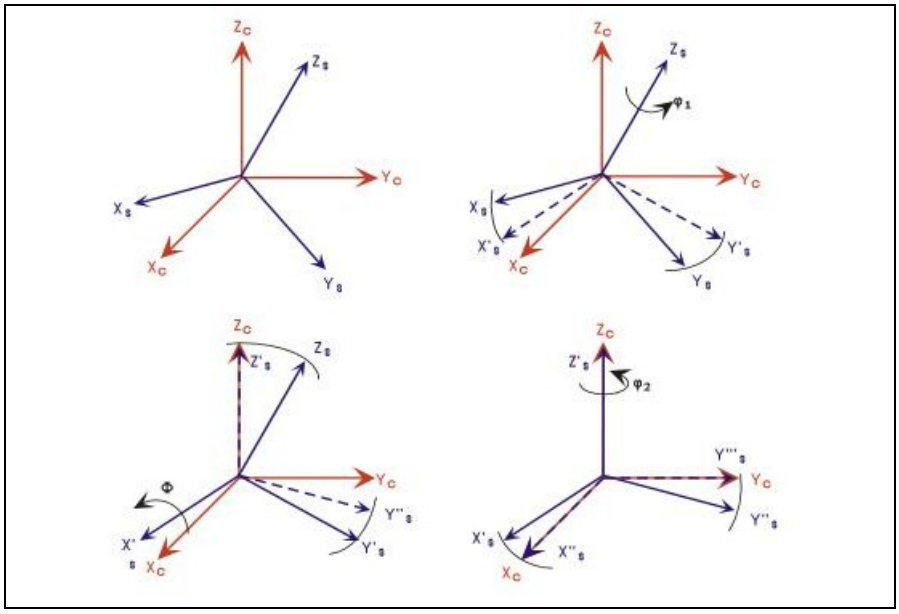


Figure IV.4 *Définition des 3 angles d'Euler ($\varphi_2, \phi, \varphi_1$) en convention de Bunge.*

Le coefficient de sensibilité à la vitesse microscopique

Le coefficient de sensibilité à la vitesse microscopique noté *n* (eq. IV.23) décrit la non linéarité du comportement viscoplastique à l'échelle du système de glissement. La valeur du coefficient de sensibilité à l'échelle du polycristal tel qu'il est mesuré lors d'essais mécaniques peut s'écarter de la valeur microscopique. Cependant, en l'absence de toute autre information, il sera choisi une valeur $n = 1/m$, où *m* est le coefficient de sensibilité macroscopique issu d'essais mécaniques. Cette hypothèse est classiquement utilisée [LOG 1999].

Les coefficients de l'opérateur d'élasticité

Les coefficients élastiques dépendent de la nature des liaisons interatomiques du matériau. Ils sont donnés dans la littérature pour les matériaux purs les plus répandus, [HOS 1993] par exemple.

IV.1.3 Les différentes stratégies de couplage méthode EF/ modèle polycristallin

IV.1.3.1 Principe général du couplage

L'intérêt du couplage Forge3® /modèle polycristallin est de calculer l'évolution texturale et microstructurale du matériau au cours de la mise en forme et de prendre en compte l'anisotropie du comportement mécanique qui en résulte. Le modèle polycristallin permet de connaître l'évolution texturale du matériau à un niveau de déformation donné et de calculer l'évolution de l'anisotropie du matériau (c'est-à-dire de sa rhéologie anisotrope) au cours de la déformation. En fait, le modèle polycristallin permet de déterminer de manière implicite la contrainte déviatorique s pour une valeur de $\dot{\varepsilon}$ donnée, sous la forme d'une loi constitutive du matériau $s = \psi(\dot{\varepsilon})$ où la fonction ψ n'est pas une fonction analytique et évolue selon la texture du matériau.

Pour un incrément donné, la méthode EF fournit à chaque élément de volume (ici l'élément fini) les conditions aux limites d'un volume polycristallin à l'aide d'un gradient de vitesse estimé. Ces conditions aux limites permettent le calcul mécanique au niveau du polycristal et celui de l'évolution de la texture cristallographique. Le modèle polycristallin fournit la rhéologie anisotrope en tenant compte de la texture courante du matériau. Cette rhéologie est ensuite utilisée par la méthode EF à l'incrément ou l'itération de calcul suivant pour produire un nouveau champ de vitesse à chaque élément du maillage. La stratégie est illustrée Figure IV.5 sur un incrément de calcul macroscopique.

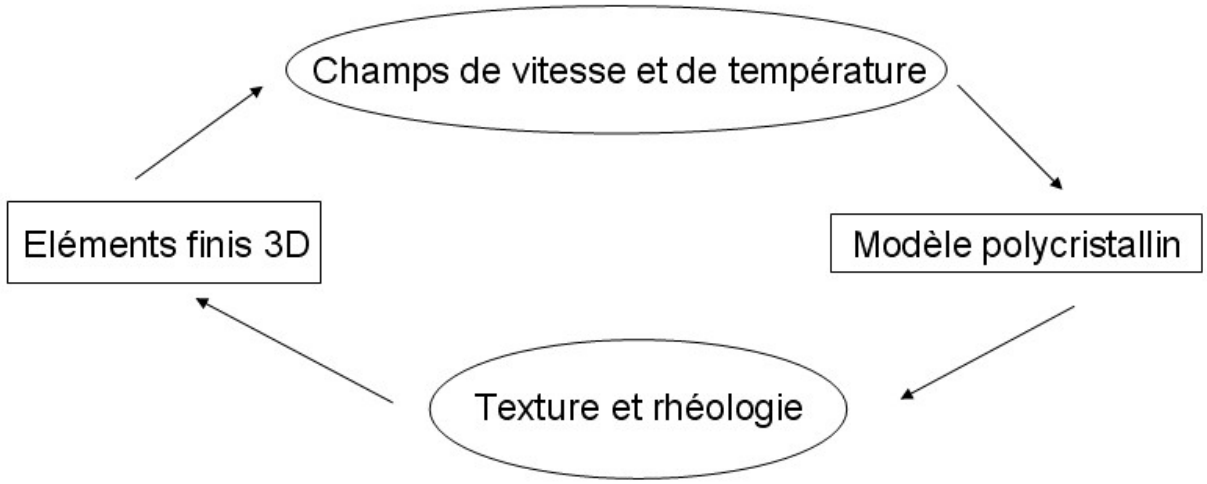


Figure IV.5 *Principe général du couplage méthode EF / modèle polycristallin pour un incrément de calcul macroscopique.*

Remarque : Dans le cas de la formulation P1+/P1 du code Forge3®, il y a plusieurs points d'intégration dans un tétraèdre, mais comme $\dot{\varepsilon}$ et s y sont constants, le modèle polycristallin est appelée au niveau d'un seul point d'intégration de l'EF. Par abus de langage, nous appellerons donc au cours de la thèse ce point le point d'intégration de l'EF ou encore l'EF.

IV.1.3.2 Stratégies de couplage

Nous allons maintenant présenter les deux stratégies de couplage possibles que nous avons développées dans Forge3®.

Le couplage fort

Pour résoudre le système d'équations (IV.12), nous avons vu que le logiciel Forge3® utilise une procédure itérative de Newton-Raphson. A chaque itération de Newton-Raphson, il résout le système linéaire (IV.13) qui dépend entre autre de la contrainte déviatorique, celle-ci dépendant elle-même du gradient de vitesse. Le couplage fort consiste à calculer à chaque itération de Newton-Raphson la contrainte déviatorique et le module tangent à l'aide du modèle polycristallin afin de l'utiliser pour l'itération suivante. Le schéma de principe du couplage fort est illustré Figure IV.6.

Le couplage faible

Le couplage faible consiste à calculer la nouvelle contrainte déviatorique à l'aide du modèle polycristallin une fois que le système (IV.12) a été résolu, c'est-à-dire pour le gradient de vitesse solution. A chaque itération de Newton-Raphson, la contrainte déviatorique peut être estimée à l'aide de la valeur de la contrainte et de sa dérivée à l'incrément précédent par une formule de type Taylor avec un reste d'ordre 1 (cf. Equation IV.37). Le schéma de principe du couplage faible est illustré Figure IV.7.

Nous remarquons donc que dans le cas du couplage fort, le modèle polycristallin est appelé, pour un incrément de temps *t*, *N(t)* fois où *N(t)* représente le nombre d'itérations de Newton-Raphson nécessaire pour la résolution de (IV.12) pour l'incrément de temps t. Ce nombre varie donc d'un incrément à l'autre.

Dans le cas du couplage faible, le modèle polycristallin est appelé une seule fois par incrément de temps. Le couplage faible permet donc de réduire le nombre d'appels au modèle polycristallin et donc le temps de calcul des simulations par rapport à l'utilisation du couplage fort.

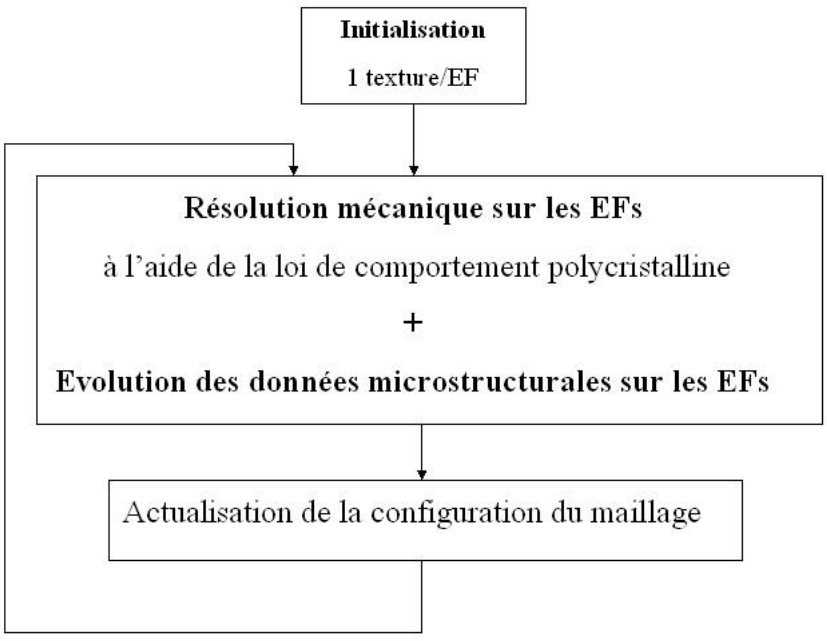


Figure IV.6 *Schéma de principe du couplage fort.*

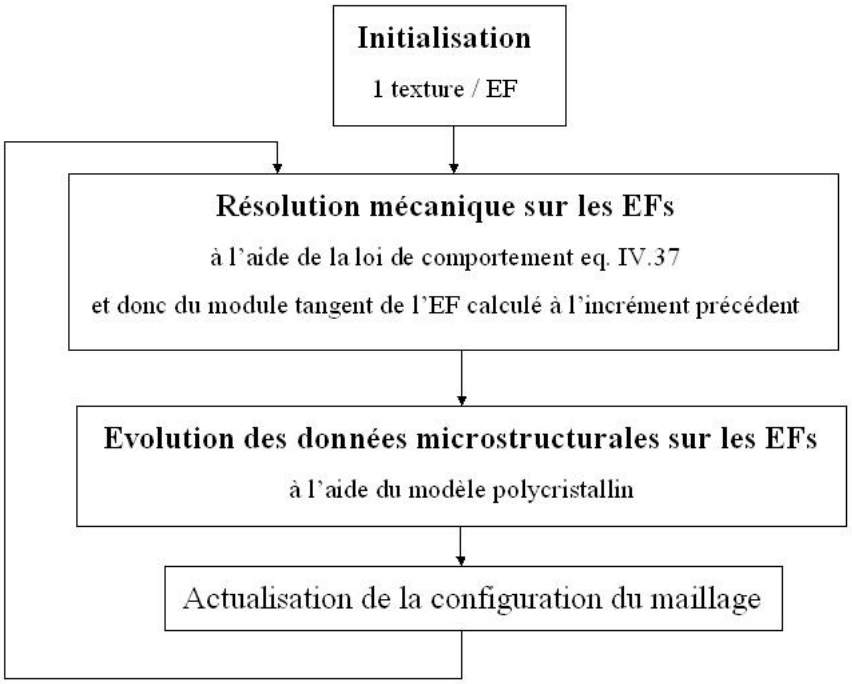


Figure IV.7 *Schéma de principe du couplage faible.*

IV.1.4 Les équations de l'interface méthode EF / Modèle polycristallin élasto-viscoplastique

IV.1.4.1 Stratégie de couplage fort

Les équations régissant l'interface entre Forge3® et la rhéologie polycristalline établissent les expressions de la contrainte déviatorique et des modules tangents issus du calcul du modèle polycristallin à chaque itération de Newton-Raphson.

En entrée du modèle polycristallin, nous avons $\nabla\vec{v}$, le gradient de vitesse macroscopique issu de la résolution EF, connu en chaque point du maillage EF. Le gradient de vitesse nous permet de calculer le tenseur de vitesse de déformation macroscopique E à l'aide de la relation $E=\frac{1}{2}\left(\nabla\vec{v}+\nabla\vec{v}^{T}\right)$. A l'aide de l'équation (IV.28) traduisant l'hypothèse de Taylor, nous en déduisons le tenseur de vitesse de déformation de chaque cristal $\dot{\varepsilon}_c$.

En sortie du calcul polycristallin, nous avons la contrainte microscopique pour chaque cristal σ_c exprimée dans le repère de l'échantillon. A l'aide de l'équation d'homogénéisation (IV.29), nous en déduisons la contrainte macroscopique Σ. Cela permet de calculer le tenseur de contrainte déviatorique *s* utilisée par Forge3® pour résoudre le système de Newton-Raphson :

$$s=\Sigma-tr(\Sigma)I \qquad (\text{IV.33}).$$

Il faut ensuite déterminer le module tangent, qui représente la dérivée du tenseur de contrainte déviatorique par rapport au déviateur du tenseur de vitesse de déformation.
La dérivée de l'équation (IV.28) par rapport à l'incrément de déformation donne l'opérateur tangent pour chaque grain :

$$\frac{\partial\sigma}{\partial(\Delta D)}=R^{*}\frac{\partial T}{\partial(\Delta D)}R^{*T}+\frac{\partial R^{*}}{\partial(\Delta D)}TR^{*T}+R^{*}T\frac{\partial R^{*T}}{\partial(\Delta D)} \qquad (\text{IV.34}).$$

Cette expression est ensuite symétrisée pour chaque grain car le module tangent de Forge3® doit être symétrique (afin que le solveur soit moins coûteux) et le module tangent pour l'ensemble du polycristal se calcule comme suit :

$$S_TGT = \left\langle \frac{\partial \sigma}{\partial (D\Delta t)} \right\rangle \Delta t \quad \text{(IV.35)}$$

où $\langle\ \rangle$ représente la moyenne sur tous les grains.

Nous faisons l'hypothèse que l'expression du module tangent bulle est la même que celle du module tangent.

Le modèle de Delannay étant un modèle élasto-viscoplastique, il nous faut donner le module de compression hydrostatique χ pour le calcul de la pression :

$$\dot{p} = -\chi\ tr(\dot{\varepsilon}) \qquad \text{(IV.36)}$$

où le point désigne la dérivée par rapport au temps. χ est égal à $C_{11} + 2C_{12}$ dans le cas des matériaux à structure cubique [HOS 1993] où les termes c_{ij} sont les constantes élastiques du matériau (cf. (eq. IV.22)). Le tenseur C_{ij} est un tenseur d'ordre 2 de dimension 6*6 obtenu en tenant compte des symétries des tenseurs contrainte et déformation à partir du tenseur d'ordre 4 C_{ijkl} de dimension 3*3*3*3.

A chaque incrément de temps, après convergence de l'algorithme de Newton-Raphson, la texture est réactualisée et les paramètres du modèle polycristallin (orientations cristallographiques, contraintes dans chaque cristal et cissions critiques qui leur sont associées) sont stockés dans un fichier afin de pouvoir faire le calcul avec ces nouvelles données à l'incrément de déformation suivant.

IV.1.4.2 Stratégie de couplage faible

Dans le cas du couplage faible, pour un incrément de temps *incr*, le module tangent bulle et le module tangent sont pris identiques à ceux calculés à l'aide du modèle polycristallin à la convergence de l'incrément de temps *incr-1*, ceci à chaque itération de Newton-Raphson. La contrainte déviatorique est estimée à l'aide d'un développement limité de Taylor à l'ordre 1 utilisant la contrainte à l'incrément précédent ainsi que le module tangent à l'incrément précédent. Une composante de la contrainte s, s_{ij} est donc calculée de la façon suivante :

$$s_{ij}^{incr} = s_{ij}^{incr-1} + \sum_{k,l} \left.\frac{\partial s_{ij}}{\partial \dot{\varepsilon}_{kl}}\right|^{incr-1} \Delta\dot{\varepsilon}_{kl}^{incr} \quad \text{(IV.37)}$$

où l'indice *incr* est l'incrément de temps courant, $\Delta\dot{\varepsilon}_{kl}^{incr} = \dot{\varepsilon}_{kl}^{incr} - \dot{\varepsilon}_{kl}^{incr-1}$ la variation de vitesse de déformation entre les deux incréments de temps, et $\left.\frac{\partial s_{ij}}{\partial \dot{\varepsilon}_{kl}}\right|^{incr-1}$ la valeur de la composante *ijkl* du module tangent à l'incrément précédent.

Une fois que l'algorithme de Newton-Raphson a convergé, la contrainte, le module tangent et le module tangent bulle sont calculés pour l'incrément *incr* à l'aide du modèle polycristallin.

Nous remarquons que l'équation (IV.37) ne peut pas être utilisée pour le premier incrément de calcul. Nous utilisons donc pour ce premier incrément de calcul le couplage fort (cf. Figure IV.7).

Au vu de la stratégie de couplage faible utilisée, nous voyons que l'erreur commise avec ce couplage dépendra de la « constance » du module tangent et de la contrainte sur un incrément de temps donné lors des itérations de Newton-Raphson, il est donc clair que cette stratégie de couplage sera sensible au pas de temps utilisé.

IV.2 Validation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin élasto-viscoplastique dans le cas où une particule Lagrangienne est positionnée au centre de gravité de chaque EF

IV.2.1 Validation de la stratégie de couplage fort

Nous appelons modèle découplé le modèle polycristallin qui pour une déformation macroscopique appliquée à un polycristal donne la contrainte macroscopique résultante et l'évolution de texture du polycristal. Le modèle élasto-viscoplastique découplé a déjà été validé [DEL 2005] et nous pouvons donc considérer la solution de ce modèle comme une solution de référence.

Pour valider le couplage fort, nous considérons un cas de compression uniaxiale d'un cube sans frottement pour un matériau Cubique Faces Centrées. L'état de déformation est alors quasi-homogène dans le maillage, ce qui nous permet de valider le modèle EF à l'aide de la solution du modèle élasto-viscoplastique découplé.

IV.2.1.1 Présentation des simulations

Nous allons tout d'abord présenter les paramètres de la simulation EF et du modèle découplé qui sont :

- les données matériaux. Ces données sont la texture initiale ainsi que les variables des lois du modèle polycristallin (cf. section IV.1.2.2).
- le maillage EF.
- les conditions de chargement.

La texture initiale

La texture initiale que nous avons choisie est la texture d'un alliage d'aluminium (AA7582) laminé à 70%, matériau à structure cristalline CFC. Cette texture est discrétisée par 1200 orientations cristallographiques initiales. Les figures de pôle {111} et {100} de la texture initiale sont représentées Figure IV.8 avec ND axe de compression, centre des figures de pôle (RD=Rolling Direction, TD= Transverse Direction).

Pour la simulation EF, nous assignons la texture initiale à chaque point d'intégration du maillage (ici comme précisé précédemment un point d'intégration par EF), et pour le modèle découplé, nous considérons le polycristal représenté par une texture initiale.

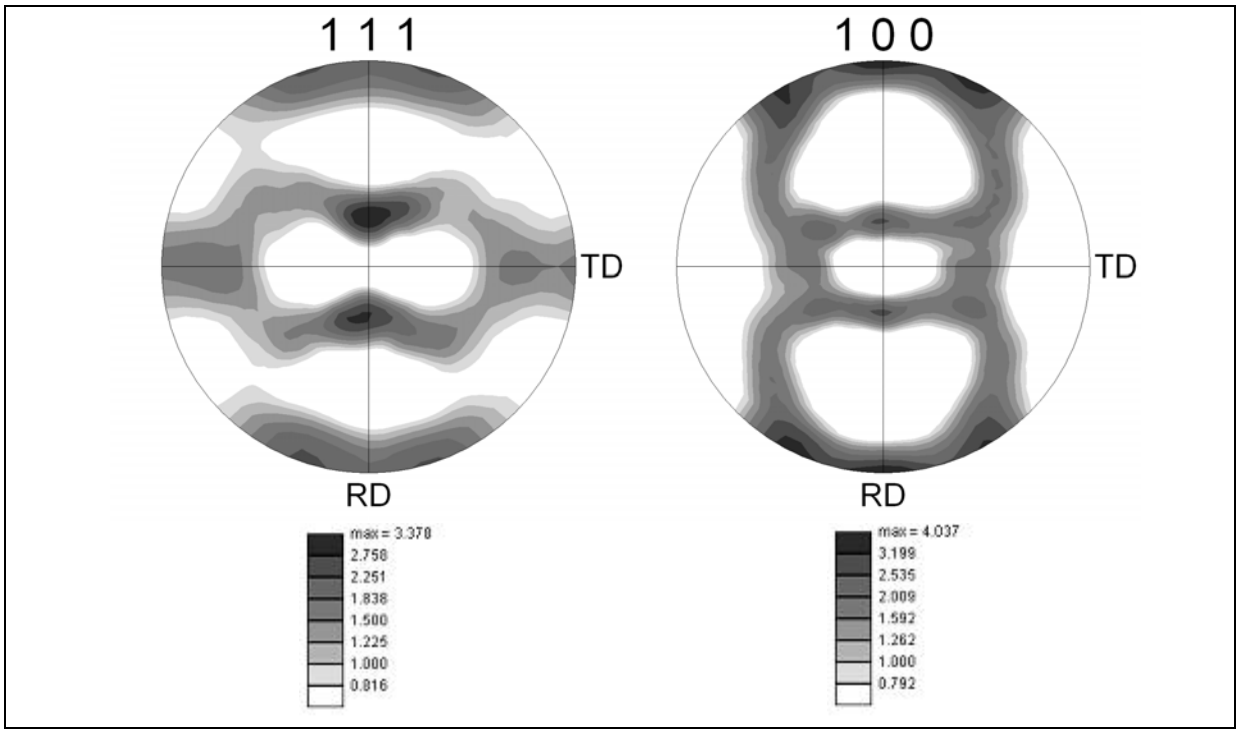


Figure IV.8 *Figures de pôle {111} et {100} de la texture initiale de l'AA7582 laminé à 70%. La compression est réalisée selon l'axe ND. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

Les paramètres matériaux

Les paramètres de la loi polycristalline sont représentés au Tableau IV.1. Nous utilisons les mêmes paramètres matériaux pour la simulations EF et pour le modèle découplé. Nous rappelons brièvement les définitions des paramètres de la loi polycristalline : les constantes C_{ij} sont les constantes élastiques de l'Aluminium, structure Cubique Faces Centrées. Ces constantes se trouvent dans la littérature [HOS 1993]. *n* est le coefficient de sensibilité à la vitesse microscopique, $H0$ est le paramètre d'écrouissage, $tauc0$ est la cission critique résolue initiale, *tausat* la contrainte à saturation et $gam0$ la vitesse de déformation caractéristique. Ces paramètres ont été détaillés par L. Delannay et al. dans [DEL 2005].

Le matériau a une structure CFC, il possède donc 12 systèmes de glissement. Le modèle élasto-viscoplastique que nous utilisons fait l'hypothèse que la cission critique résolue est la même pour chacun de ces systèmes de glissement.

C_{11}	C_{12}	C_{44}	*n*	$gam0$	$tauc0$	*tausat*	$H0$
107.3	60.9	28.3	50.0	0.001	0.1	0.3	0.03

Tableau IV.1 *Paramètres du modèle polycristallin de Taylor (GPa)*

Maillage EF et géométrie du lopin

Le lopin est un cube de 1mm de côté. Le maillage EF considéré est composé de 48 EF tétraédriques de volumes variables (Figure IV.9).

Les conditions de chargement

L'essai mécanique simulé est un essai de compression uniaxiale. Le lopin est comprimé de 60% (déformation vraie de 0.916) selon l'axe z avec un contact glissant afin que la déformation dans

le maillage soit quasi-homogène. La presse mécanique est contrôlée avec une vitesse constante de $1mm.s^{-1}$, pour une hauteur initiale de lopin de 1mm. La simulation EF est menée avec un pas de temps constant de 0.003 *s*. Le nombre d'incréments dans la simulation EF est donc de 200.

Dans le cas du modèle découplé, les données d'entrée correspondantes sont les suivantes :

- les conditions aux limites utilisées sont de type mixte (à la fois sur ε et σ) et seules certaines composantes des tenseurs déformation et contrainte sont imposées :
  - o $\varepsilon_{33} = -0.916$
  - o $\sigma_{11} = \sigma_{22} = 0$
- le nombre d'incréments de déformation est prescrit à 200,
- le pas de temps pour chaque incrément est de 0.003.

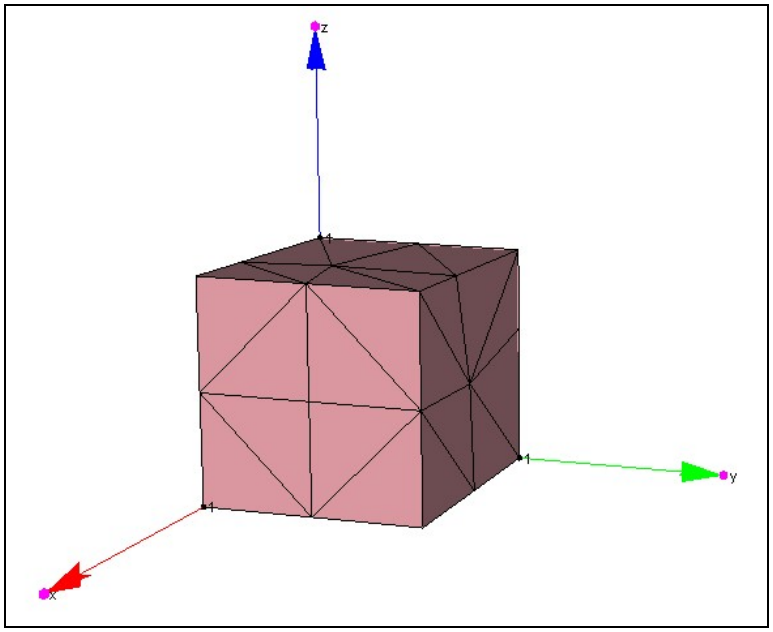


Figure IV.9 *Maillage du cube composé de 48 EF tétraédriques à volumes variables. Cas de compression uniaxiale selon l'axe z.*

IV.2.1.2 Résultats en terme de prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture

Dans l'ensemble de ce travail (sauf mention spécifique), la prédiction d'anisotropie mécanique est étudiée à l'aide des rapports $L1/L2$ et $L1/L3$ où $L1$, $L2$ et $L3$ représentent respectivement les élongations moyennes sur une zone donnée du maillage selon les directions *x*, *y*, et *z*. Ces élongations moyennes sont calculées à partir des gradients de déplacement des éléments finis pondérés par le volume des éléments finis comme indiqué ci-dessous :

$$L_i = \sum_{elt \in Zone} \frac{Vol(elt)}{Voltot}\left(F_{ii}(elt) + 1\right) \quad \forall\, i = 1,2,3 \quad \text{(IV.38)}$$

où *Zone* représente une zone donnée du maillage, *Vol(elt)* le volume de l'EF *elt*, *Voltot* le volume de *Zone* et $F_{ij}(elt)$ la composante *ij* du tenseur gradient de déplacement associé à l'élément *elt*.

Les résultats concernant les rapports d'anisotropie calculés sur le maillage entier sont reportés Tableau IV.2. La différence maximale est de 6.5% pour le rapport $L1/L3$, ce qui est acceptable. Les différences obtenues en terme de prédiction d'anisotropie mécanique sont liées au fait que la

déformation n'est pas identique sur tous les EFs. Cela s'explique par le nombre insuffisant d'EFs dans l'épaisseur de la pièce (Figure IV.9) et par la géométrie du lopin. Cependant, nous ne maillerons pas plus finement la pièce en raison du temps de calcul des simulations qui est déjà de 143 min pour seulement 48 EFs, et augmente de manière quasi-proportionnelle en fonction du nombre d'EFs considéré puisque dans ce cas le nombre d'appel au modèle polycristallin est égal au nombre d'EFs considéré dans le maillage pour une itération de Newton-Raphson donnée.

	$L1/L2$	$L1/L3$
Modèle découplé	1.617	5.020
Simulation EF	1.575	4.694

Tableau IV.2 *Rapports d'anisotropie.*

La prédiction de texture est elle aussi correcte comme le montre la comparaison des Figures IV.10 et IV.11. De petites différences sont observées pour les niveaux d'intensité des figures de pôle mais elles sont de l'ordre de 1%. Elles peuvent être expliquées par le fait que nous comparons les figures de pôle obtenues pour 1200 orientations cristallographiques dans le cas du modèle découplé et pour 48*1200 orientations dans le cas de la simulation EF. Cette explication est corroborée par le fait que le niveau d'intensité est légèrement moins élevé lorsque le nombre d'orientations cristallographiques représentées est plus élevé. Cette différence est aussi liée au fait que la déformation n'est pas homogène sur tous les EFs, comme discuté plus haut.

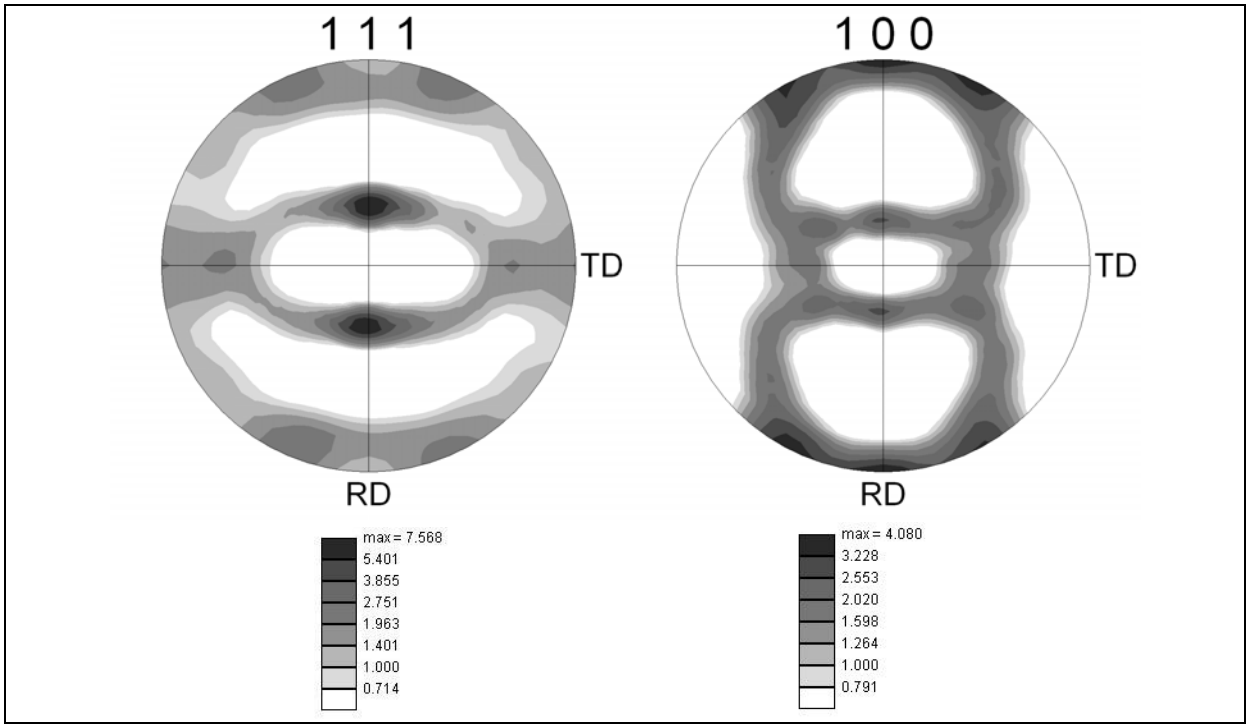


Figure IV.10 *Figures de pôle {111} et {100} pour la simulation « découplée » avec 1200 orientations et 60% de déformation où ND représente l'axe de compression z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

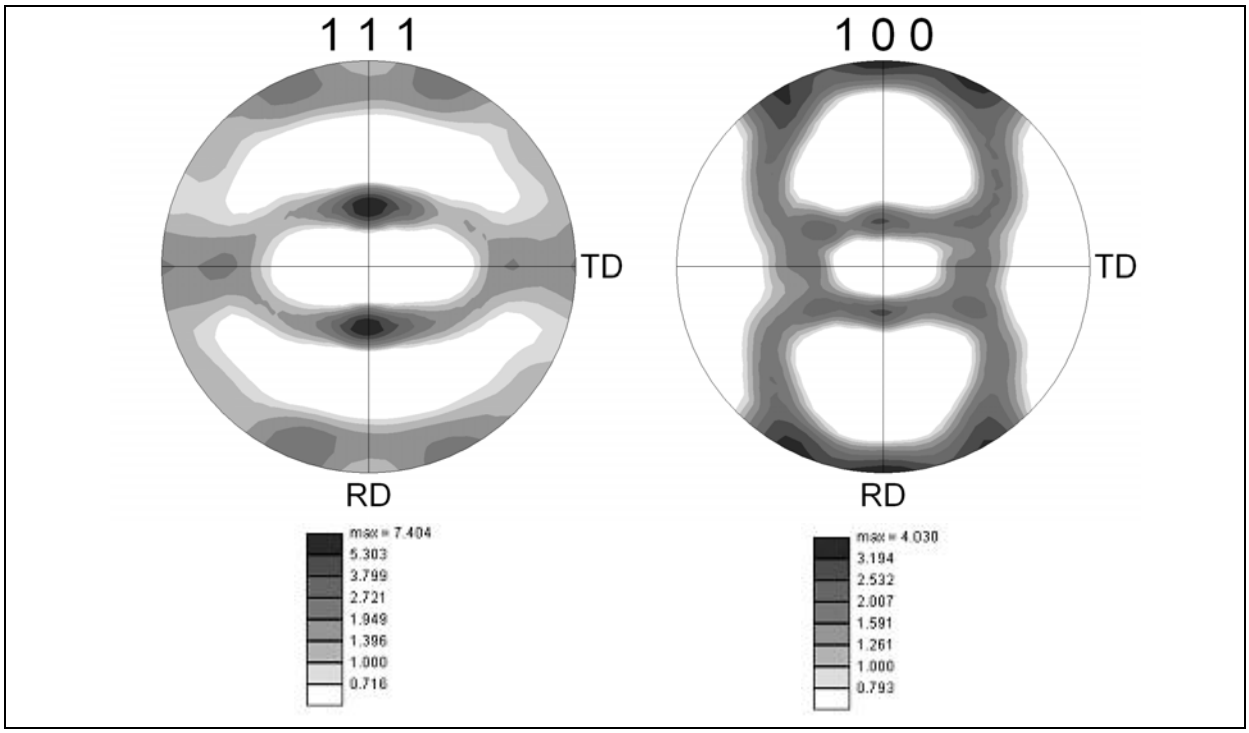


Figure IV.11 *Figures de pôle {111} et {100} pour la simulation EF après 60% de déformation et une texture initiale /EF où ND représente l'axe de compression z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

IV.2.1.3 Conclusion

Les résultats obtenus en terme de prédiction d'anisotropie et d'évolution de texture obtenus dans le cas de la simulation EF et du modèle découplé sont très proches. Ils permettent donc de valider l'implémentation du couplage fort EF/ modèle polycristallin élasto-viscoplastique. Dans la suite de notre travail, nous utiliserons à nouveau ces résultats, que nous désignons sous le nom de « Simulation du cube Taylor-Fort ».

IV.2.1.4 Etude complémentaire : Temps de calcul des simulations en fonction du nombre d'EFs dans le maillage et du nombre d'orientations cristallographiques

Pour étudier l'influence du nombre d'orientations dans le maillage sur le temps de calcul des simulations en couplage fort, nous avons considéré un cube (dimensions : 1*1*1 mm3) maillé à l'aide de : 48, 465, 1497, 3461 et 6550 tétraèdres. Le seul résultat que nous examinons dans cette étude complémentaire est le temps de calcul des simulations.

Les données d'entrée du problème sont :

- La texture initiale est discrétisée par 100 orientations cristallographiques. Une texture initiale est considérée à chaque EF. Les paramètres du modèle polycristallin sont reportés Tableau IV.1.
- La presse est pilotée à vitesse constante de $1 mm.s^{-1}$ et le contrôle se fait à pas de temps constant de 0.003s. La déformation moyenne vraie est de 0.6 pour un taux d'écrasement de 45%. Le nombre d'incréments de calcul est donc de 150.

Le temps de calcul des simulations est reporté Figure IV.12 en fonction du nombre d'EFs considéré. Les différents graphes correspondent aux taux d'écrasement suivants : 15% (50 incréments de calcul), 30% (100 incréments de calcul) et 45% (150 incréments de calcul). Nous voyons que le temps de calcul est quasiment proportionnel au nombre d'EFs dans le maillage. Cela nous permet de penser que le temps de calcul dans ce type de simulation utilisant une rhéologie polycristalline est

quasiment proportionnel au nombre d'appels au modèle polycristallin, et donc au temps de calcul du modèle polycristallin. Le temps de calcul du modèle polycristallin dépend quant à lui du nombre d'orientations utilisées pour discrétiser la texture cristallographique.

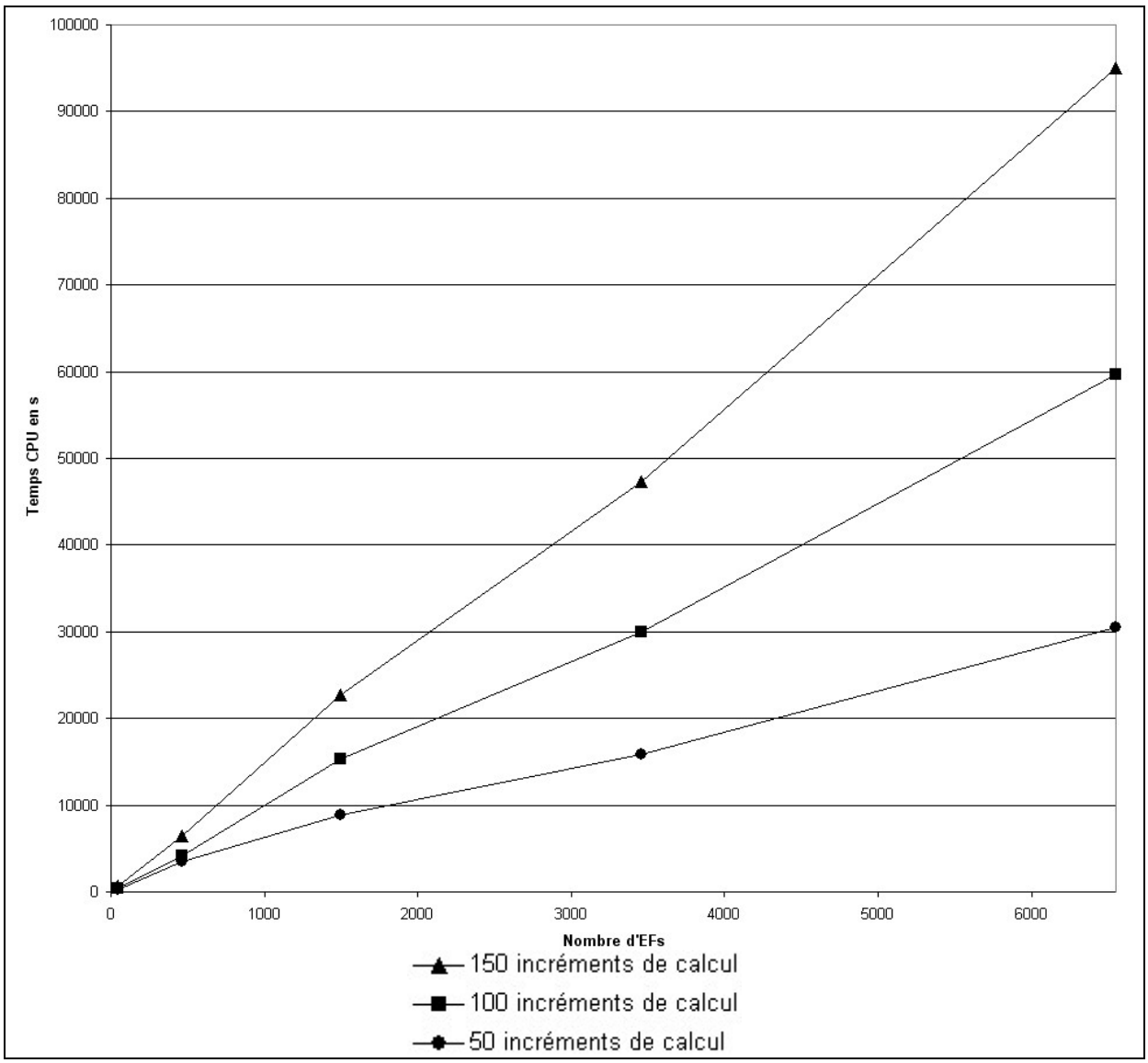


Figure IV.12 *Evolution du temps CPU en s en fonction du nombre d'EFS pour différents taux d'écrasement avec un Pentium IV (1.8 GHz).*

Nous avons aussi étudié la compression d'un cube composé de 48 EFs avec cette fois une texture discrétisée par 1200 orientations cristallographiques (soit 12 fois plus d'orientations que pour la texture précédente). En comparaison du temps de calcul de la simulation avec une texture discrétisée par 100 orientations, le temps de calcul est multiplié par un facteur 15. Ce facteur est assez proche de 12 (sachant que les orientations ne représentent plus la même texture et donc que le comportement mécanique se trouve modifié). Cela nous permet de vérifier que, comme l'avait remarqué Habraken [HAB 2004], le temps de calcul est quasi-proportionnel au nombre d'orientations considérées en chaque point d'intégration du maillage EF.

IV.2.2 Validation de la stratégie de couplage faible

Pour valider le couplage faible Forge3® / Modèle élasto-viscoplastique, nous simulons un cas de compression uniaxiale avec frottement. La simulation de référence que nous utilisons est la simulation pour les mêmes conditions (matériaux et conditions de chargement) avec le couplage fort, celui-ci ayant été validé précédemment.

IV.2.2.1 Présentation des simulations

Les paramètres matériaux et variables polycristallines sont les mêmes que ceux pour la simulation « Simulation du cube Taylor-Fort ».

Le lopin considéré est un cylindre de hauteur 200mm et de diamètre 100mm. Compte tenu des symétries de la pièce et du fait que la texture initiale a une symétrie d'ordre 4 (Figure IV.8), nous avons trois plans de symétrie : deux plans de symétrie dans le plan perpendiculaire à l'axe de compression (selon les axes x et y cf. Figure IV.13) et un plan de symétrie à mi-hauteur. Nous ne maillons par conséquent qu'un huitième du cylindre avec un maillage composé de 1085 EFs (Figure IV.13).

Le lopin est comprimé uniaxialement selon z d'un taux de déformation de 45%. La presse est pilotée à une vitesse constante de 1mm. s^{-1}, pour une hauteur initiale de lopin de 100 mm.

Nous considérons un contact frottant à l'aide d'un coefficient de frottement μ égal à 0.3. La loi de frottement utilisée est une loi de type Tresca [MON 1994] :

$$\tau = -\mu\sigma_0 / \sqrt{3} \quad (\text{IV.38})$$

où μ représente le coefficient de frottement, τ la contrainte de cisaillement due au frottement et σ_0 la contrainte d'écoulement.

Le pas de temps de la simulation est de 0.3s, le nombre d'incréments est donc de 150.

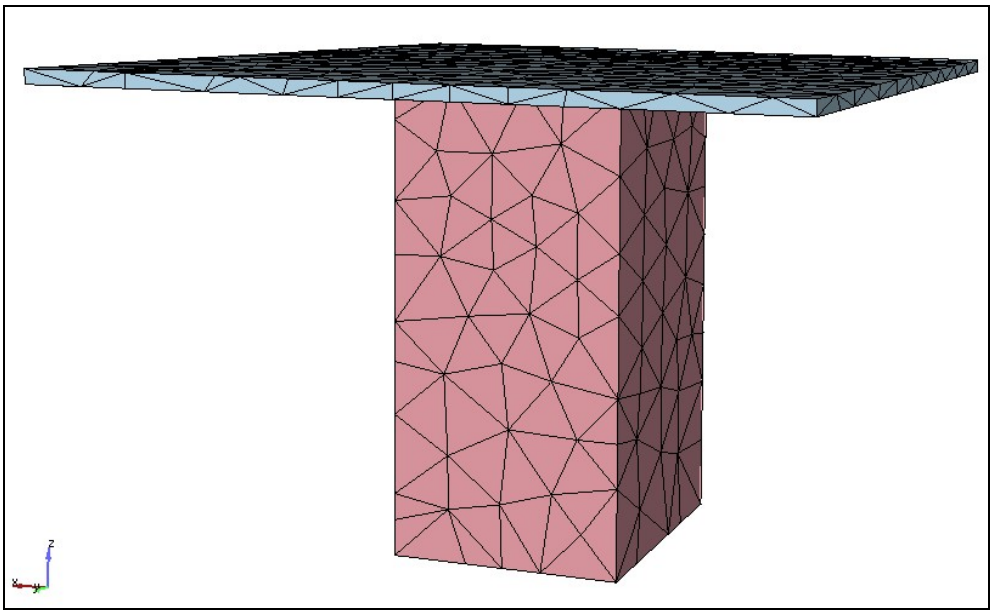


Figure IV.13 *Maillage du quart de cylindre composé de 1085 EFs. Trois plans de symétrie selon les axes x, y et z.*

IV.2.2.2 Résultats des simulations

IV.2.2.2.1 Temps de calcul des simulations

Le temps de calcul des deux simulations est reporté Tableau IV.3 en fonction du couplage utilisé. Nous voyons que le temps de calcul de la simulation « couplage fort » est beaucoup plus élevé que celle du « couplage faible ». Le facteur de réduction entre les deux simulations est de 6.6. Ce résultat est dû au fait que dans le cas du « couplage faible », le modèle polycristallin est utilisé une seule fois par incrément de temps alors que pour le « couplage fort », le nombre d'appels au modèle polycristallin est égal au nombre d'itérations de Newton-Raphson à chaque incrément de temps (cf. IV.1.3.2).

	Temps CPU
Simulation « couplage fort »	55h40min
Simulation « couplage faible »	8h23min

Tableau IV.3 *Temps CPU des simulations en fonction du couplage utilisé avec un Pentium IV (1.8 GHz).*

IV.2.2.2.2 Prédiction d'anisotropie et évolution de texture

Les prédictions d'anisotropie pour la déformation finale moyenne de 0.6 sont données Tableau IV.4 à l'aide des rapports $L1/L2$ et $L1/L3$ sur le maillage entier (éq. IV.38) en fonction du couplage utilisé. La différence maximale entre les deux types de couplage est de 0.07% pour le rapport $L1/L2$. Il n'y a donc pas de différence entre les rapports d'anisotropie prédits par les simulations « couplage fort » et « couplage faible », pour le pas de temps utilisé.

	$L1/L2$	$L1/L3$
Simulation « couplage fort »	1.251	2.662
Simulation « couplage faible »	1.252	2.662

Tableau IV.4 *Rapports d'anisotropie dans le maillage entier – déformation vraie de 0.60.*

Nous allons maintenant étudier l'anisotropie développée dans la bande de localisation de déformation. Cette bande de localisation apparaît à un angle d'environ 45° par rapport à l'axe de compression et est la conséquence des effets de frottement. Les éléments finis appartenant à la bande de localisation sont définis à l'aide de la simulation avec couplage fort comme étant les éléments finis dont la déformation équivalente est comprise entre 0.7 et 1.1 (la déformation nominale étant de 0.6), ils sont au nombre de 308 (Figure IV.15). La borne supérieure est prise à 1.1 afin de ne pas prendre en compte les éléments en contact avec l'outil qui ont une déformation très élevée à cause de la gestion du contact avec l'outil et au fait qu'ils deviennent quasiment des EFS en 2 dimensions, étant très aplatis. Une fois les éléments finis appartenant à la bande de localisation connus, nous étudions les rapports d'anisotropie obtenus sur l'ensemble de ces éléments dans les deux cas de couplage. Nous pouvons remarquer en comparant la répartition de la déformation équivalente dans le cas du couplage faible et du couplage fort (Figure IV.14) que les éléments finis ont quasiment la même déformation équivalente selon la stratégie de couplage utilisée. Les résultats obtenus sont répertoriés Tableau IV.5. Nous obtenons une différence maximale de 0.48% pour le rapport *L1/L3*, plus élevée que celle obtenue sur le maillage entier qui était de 0.07%. Cette différence reste donc encore très faible.

Nous avons donc à l'aide de la simulation avec couplage faible une bonne prédiction d'anisotropie mécanique dans le maillage entier et dans la zone la plus déformée. Ceci nous permet de valider l'implémentation du couplage faible entre modèle élasto-viscoplastique et code EF Forge3®.

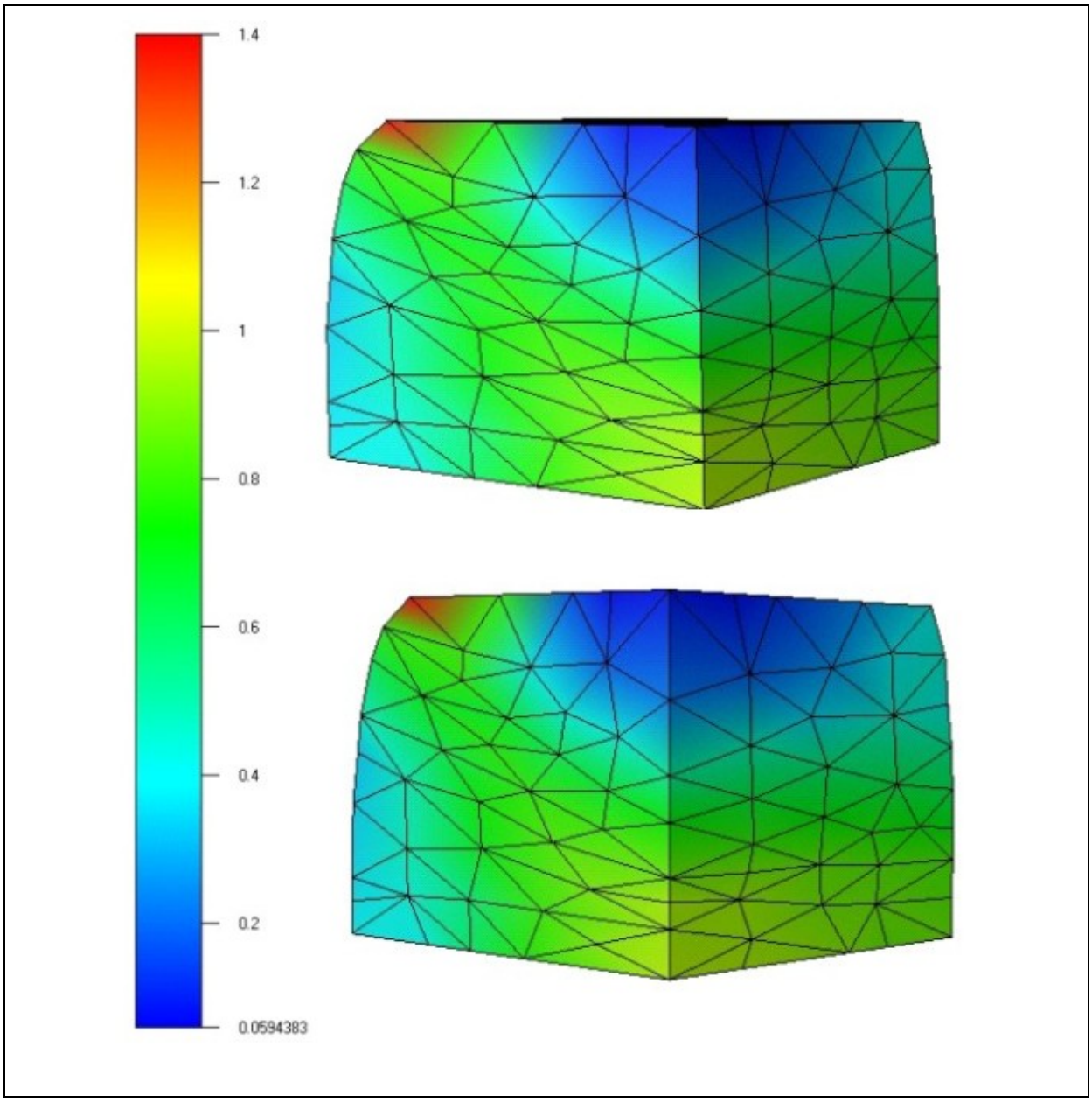


Figure IV.14 *Répartition de la déformation équivalente sur le maillage. En haut, simulation couplage fort et en bas, simulation couplage faible.*

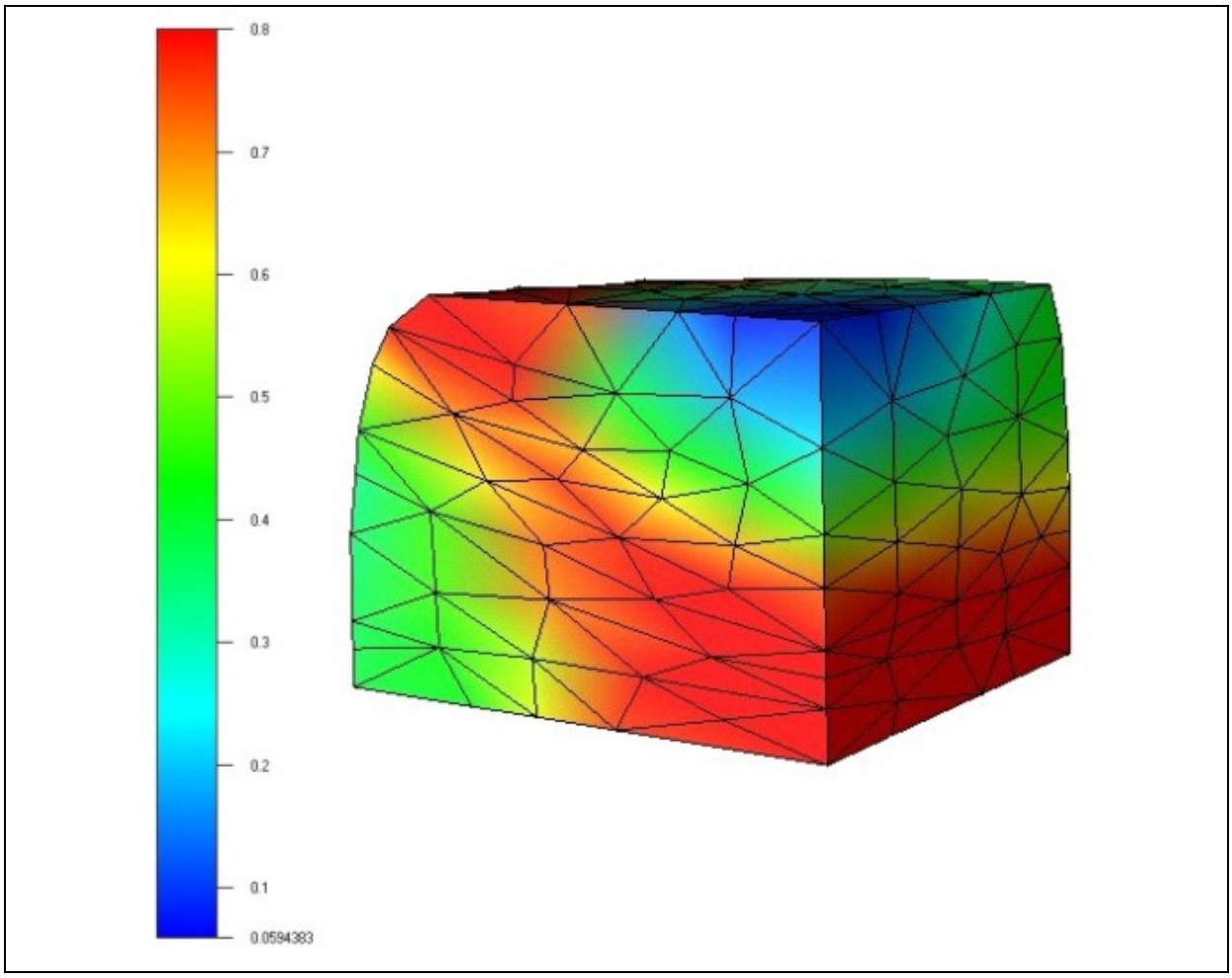


Figure IV.15 *Champ de déformation hétérogène dans le cylindre induite par le frottement. Mise en évidence de la bande de localisation pour le couplage fort avec une texture par EF. En rouge, EFs dont la déformation équivalente est supérieure à 0.7.*

	$L1/L2$	$L1/L3$
Simulation « couplage fort »	1.427	3.926
Simulation « couplage faible »	1.430	3.945

Tableau IV.5 *Rapports d'anisotropie dans la zone déformée composée de 308 EFS – déformation vraie de 0.6.*

Nous allons maintenant analyser la prédiction de l'évolution de texture sur le maillage entier (Figures IV.16 et IV.17) et sur la zone déformée (Figures IV.18 et IV.19) à la fin de la simulation, soit pour un taux d'écrasement de 45%. Les Figures de pôle sont identiques pour les 2 types de couplage quelque soit la zone du maillage concernée. On note quelques différences au niveau de l'intensité des Figures de pôle mais elles sont minimes.

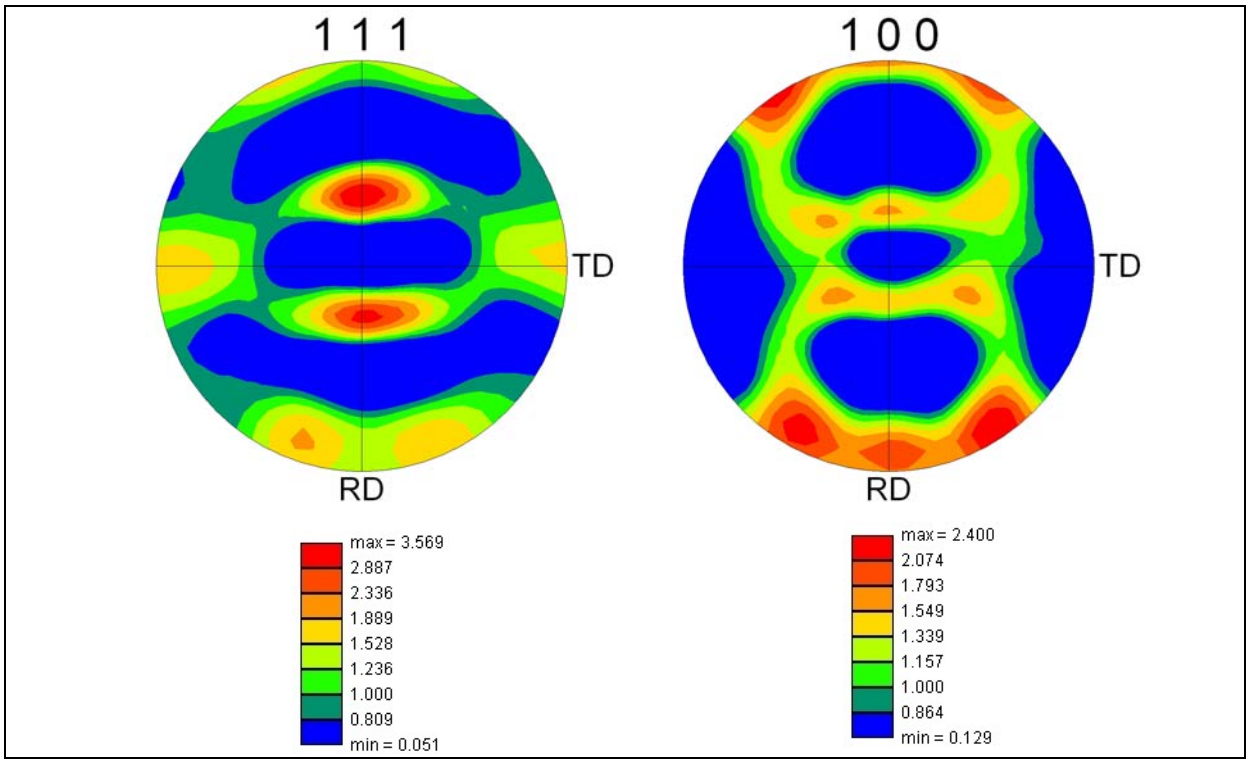


Figure IV.16 *Figures de pôle {111} et {100} dans le maillage tout entier après compression uniaxiale de 45% avec frottement, « couplage fort ». ND est l'axe de compression z du cylindre, RD est x et TD est y.*

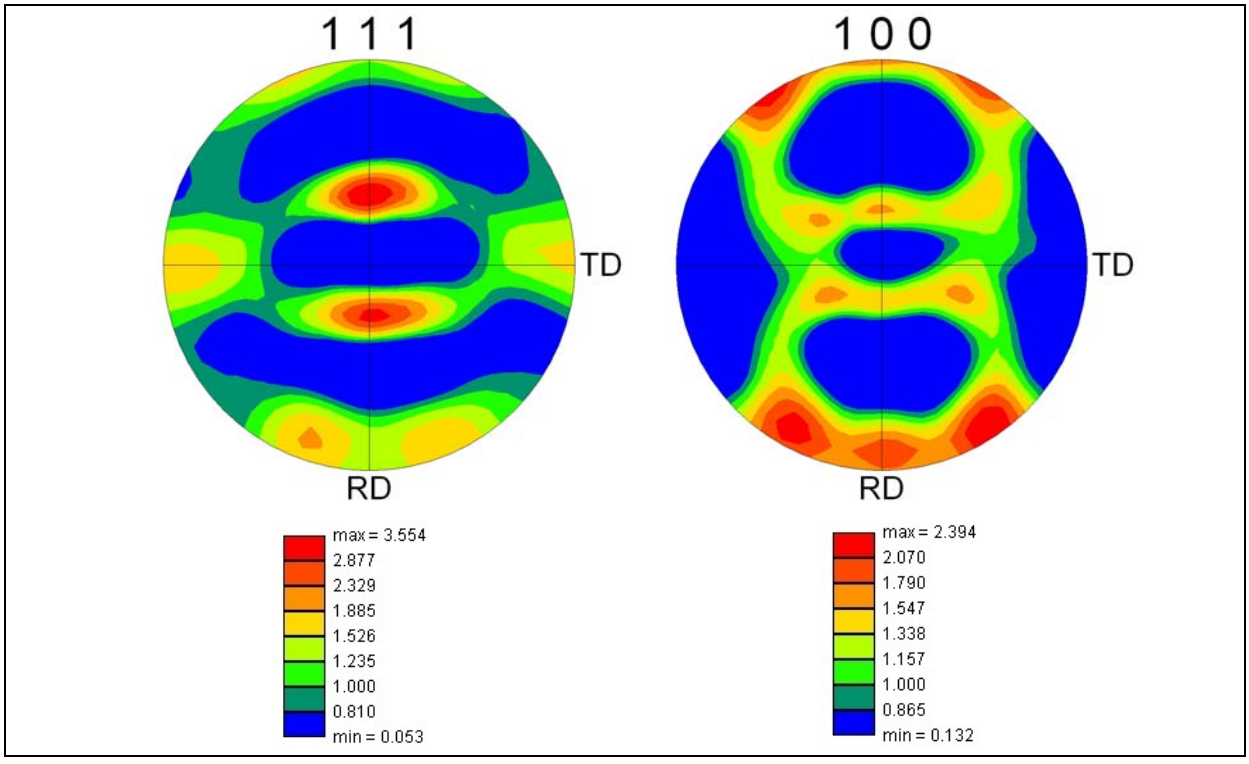


Figure IV.17 *Figures de pôle {111} et {100} dans le maillage tout entier après compression uniaxiale de 45% avec frottement, « couplage faible ». ND est l'axe de compression z du cylindre, RD est x et TD est y.*

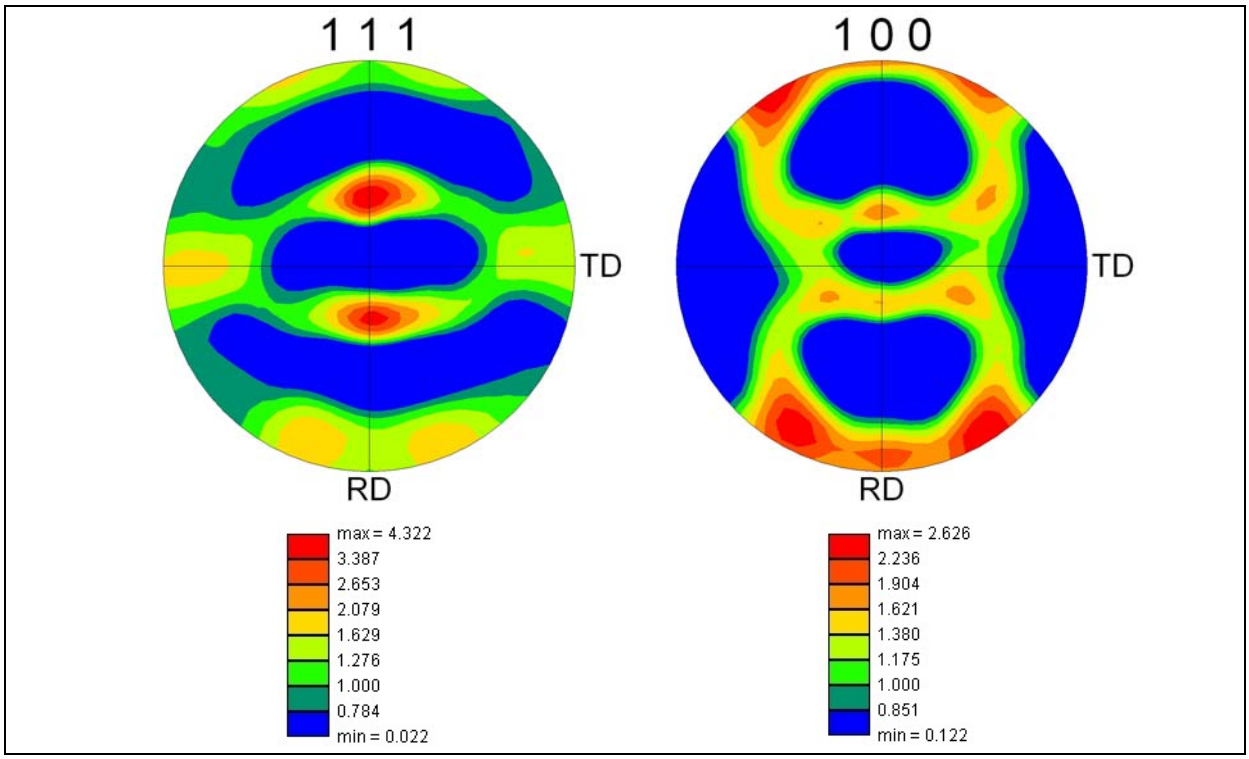


Figure IV.18 *Figures de pôle {111} et {100} dans la bande de localisation de déformation après compression uniaxiale de 45% avec frottement, « couplage fort ». ND est l'axe de compression du cylindre, RD est x et TD est y.*

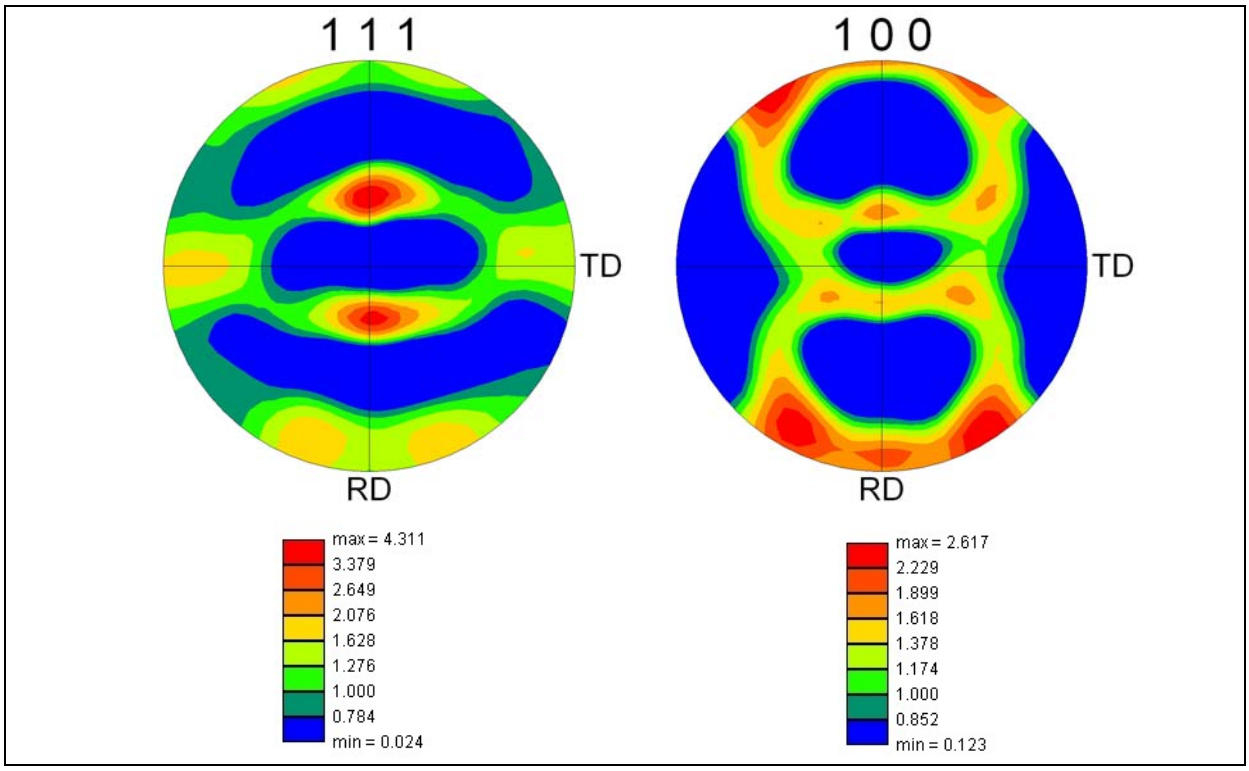


Figure IV.19 *Figures de pôle {111} et {100} dans la bande de localisation de déformation après compression uniaxiale de 45% avec frottement, « couplage faible ». Axe ND est l'axe de compression du cylindre, RD est x et TD est y.*

Afin d'analyser l'influence du pas de temps sur la précision de la prédiction de l'anisotropie mécanique, nous avons repris la simulation présentée en IV.2.2.1 et nous avons augmenté le pas de temps. Nous avons choisi au lieu d'un pas de temps de 0.3s, un pas de temps de 0.6s et de 1s. Pour les pas de temps considérés, l'anisotropie mécanique est là encore correctement prédite, puisque nous obtenons une différence maximale par rapport à la simulation couplage fort et un pas de temps de 0.3s strictement inférieure à 2%.

IV.2.2.3. Conclusion

Au vu des résultats en terme de prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture, l'implémentation de la stratégie de couplage faible est validée. En effet, les différences pour la prédiction d'anisotropie mécanique entre le couplage fort et le couplage faible sont au maximum de l'ordre de 0.48% (obtenues dans la bande de localisation). Nous retiendrons que la stratégie de couplage faible, dans le cas de la simulation du cylindre avec frottement, permet de réduire le temps de calcul d'un facteur 6.6.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré qu'un modèle polycristallin élasto-viscoplastique de Taylor [DEL 2005] a été correctement implémenté dans le code EF Forge3® pour les deux types de couplage envisagés. Nous voyons à l'aide de ces premiers résultats que le couplage faible permet une forte réduction du temps de calcul. De plus, cette stratégie de couplage donne des précisions satisfaisantes sur les rapports d'anisotropie pour la gamme de pas de temps étudiés, puisque l'écart obtenu est inférieur à 2%, obtenue pour le pas de temps le plus grand.

Cependant, le temps de calcul reste encore très élevé puisqu'il atteint 8h23min (temps CPU) avec la stratégie de couplage faible, pour un maillage de 1085 EFs, une texture initiale composée de 1200 orientations cristallographiques et une déformation de 0.6. Le prochain objectif de notre travail est de proposer une méthode pour diminuer davantage le temps de calcul, les simulations de procédés de mise en forme nécessitant fréquemment des maillages composés d'un bien plus grand nombre d'éléments.

Références bibliographiques

[ALI 2000] C. Aliaga, Simulation numérique par éléments finis en 3D du comportement thermomécanique au cours du traitement thermique des aciers : application à la trempe de pièces forgées ou coulées, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 2000.

[BOY 1999] E. Boyère, Contribution à la simulation numérique tridimensionnelle du forgeage à chaud : étude du contact et calcul multi-grille, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 1999.

[BUN 82] H.J. Bunge, Texture analysis in materials science, Butterworth & Co Publishers, 1982.

[DAW 2003] P.R. Dawson, S.R. MacEwen and P-D. Wu, Advances in sheet metal forming analyses : dealing with mechanical anisotropy from crystallographic texture, International Material Reviews 48, N°2, pp. 86-122, 2003.

[DEL 2005] Delannay L, Logé RE, Signorelli JW and Chastel Y, Evaluation of a multisite model for the prediction of rolling textures in hcp metals, Int. J. Forming Processes 8, 2-3, pp. 159-178, 2005.

[DEL 2006] Delannay L., P.J. Jacques, S.R. Kalindidi, Finite element modeling of crystal plasticity with grains shaped as truncated octahedrons, Int. J. Plasticity 22, pp. 1879-1898, 2006.

[GIL 1980] J. Gil Sevillano, P. Van Houtte and E. Aernoudt, Large strain work hardening and texture, Prog. Mat. Sc. 25, pp. 69-412, 1980.

[HAB 2004] A.M. Habraken and L. Duchêne, Anisotropic elasto-plastic finite element analysis and using a stress-strain interpolation method based on polycrystalline model, Int. J. Plasticity 20, pp. 1525-1560, 2004.

[HOS 1993] W.F. Hosford, The mechanics of crystals and textured polycrystals, Eds. Oxford Science Publications, 1993.

[HUT 1977] J.W. Hutchinson, Creep and plasticity of hexagonal polycrystals as related to single crystal slip, Metall. Trans. A, vol. 8A, pp.1465-1469, 1977.

[KAL 2001] S. R. Kalindidi, Modeling anisotropic strain hardening and deformation textures in low stacking fault energy fcc metals, Int. J. Plasticity, 17, pp. 837-860, 2001.

[LOG 1999] R.E. Logé, Influence des conditions thermomécaniques et de la microstructure sur les évolutions de texture cristallographiques du Zircaloy-4 en mise en forme à chaud, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 1999.

[MON 1994] P. Montmitonnet, Lois de frottement et mesure du frottement, In : Séminaire de plasticité Eléments finis et mise en forme des métaux, Tome1, Sophia-Antipolis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, CEMEF, chap. 4, 26-30 septembre 1994.

[PER 2000] E. Perchat, Mini-Elément et factorisations incomplètes pour la parallélisation d'un solveur de Stokes 2D. Application au forgeage, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 2000.

[SIM 1998] J.C. Simo and T.J.R. Hughes, Computationnal Inelasticity I. A. M. Series (vol.7), Eds. J.E. Marsden, L. Sirovitch, S. Wiggins, Springer Verlag, New-York, 1998.

[VAN 1988] P. Van Houtte, A comprehensive mathematical formulation of an extended Taylor-Bishop-Hill model featuring relaxed constraints, the Renouard-Wintenberger theory an a strain rate sensitivity model, Textures and Microstructures, 8-9, pp. 313-350, 1988.

Chapitre V

Méthode de réduction du temps de calcul à l'aide du concept des particules Lagrangiennes

Sommaire

V.1 Les méthodes de réduction du temps de calcul existantes ……. 76
V.1.1 Réduction du nombre d'appels au modèle polycristallin ……... 76
V.1.2 Réduction du nombre d'orientations cristallographiques nécessaires pour représenter la texture du matériau …… 76
V.1.2.1 Les méthodes de discrétisation de texture à partir de la FDO ……... 77
V.1.2.2 Application originale de la méthode de la composante de texture …… 77
V.2 Une nouvelle méthode de réduction du temps de calcul : la distribution spatiale des orientations dans le maillage EF ……..……... 79
V.2.1 Principe général …….. 79
V.2.2 La méthode de distribution constante ……. 80
V.2.3 La méthode de distribution selon le volume …….. 80
V.3 Etude des deux méthodes de distribution des orientations dans les EFs et choix d'une méthode ……..……. 81
V.3.1 Présentation des simulations …….. 81
V.3.2 Résultats des simulations …… 82
V.3.2.1 Validation de l'implémentation des deux méthodes de distribution ……. 82
V.3.2.2 Evolution de texture et prédiction d'anisotropie selon les différents nombres de textures distribuées et la méthode de distribution utilisée …….. 83
V.3.2.3 Temps de calcul des simulations ……... 85
V.3.3 Discussion préliminaire …….. 85
V.3.4 Influence du maillage EF …… 89
V.3.5 Discussion …….. 90
V.4 Application de la méthode de distribution selon le volume dans un cas de déformation hétérogène avec une seule particule ……. 91
V.4.1 Compression du cylindre avec frottement …….. 91
V.4.1.1 Présentation des simulations …….. 91
V.4.1.2 Résultats des simulations ……... 92
V.4.1.2.1 Prédiction de l'anisotropie mécanique …….. 92
V.4.1.2.2 Prédiction de l'évolution de texture cristallographique …… 93
V.4.1.3 Temps de calcul des simulations ……... 95
V.4.1.4 Conclusion ……. 95
V.4.2 Application de la méthode de distribution selon le volume à un procédé de mise en forme : l'emboutissage de coupes cylindriques. Etude menée par L. Delannay ……. 97
V.4.2.1 Simulation préliminaire : test de traction uniaxiale ……... 97
V.4.2.2 Simulation EF de l'emboutissage …….. 98
V.4.2.3 Résultats des simulations d'emboutissage ……. 100
V.4.2.4 Discussion ……..…….. 102

V.5 Application de la méthode de distribution dans un cas de déformation hétérogène avec plusieurs particules Lagrangiennes ……..…… 102
V.5.1 Méthode de distribution des orientations avec plusieurs particules ...…… 102
V.5.1.1 Principe général des deux méthodes de distribution des orientations sur les particules ……... 103
V.5.1.1.1 La méthode de distribution selon le volume ……. 103
V.5.1.1.2 La méthode de distribution semi-constante …….. 103
V.5.1.2 Comparaison des deux méthodes de distribution des orientations sur les particules ……. 103
V.5.2 Comparaison d'un cas avec une seule particule et plusieurs particules pour le couplage fort et le couplage faible ……... 106
V.5.2.1 Présentation des simulations …….. 106
V.5.2.2 Résultats ……..……... 106
V.5.2.2.1 Prédiction d'anisotropie mécanique …….. 106
V.5.2.2.2 Temps de calcul des simulations …….. 108
V.5.2.3 Discussion ……. 108
Conclusion ……. 109
Références bibliographiques ……... 110

Dans ce chapitre, nous présentons une nouvelle méthode de réduction du temps de calcul des simulations EFs couplées à une rhéologie décrite par un modèle polycristallin, en utilisant le concept des particules Lagrangiennes. Ce chapitre se décompose de la manière suivante :

Dans une première section, nous présentons un bref aperçu des différentes techniques de réduction du temps de calcul des simulations EF couplées à une rhéologie de type modèle polycristallin actuellement utilisées dans la littérature.

Dans une seconde section, nous proposons une méthode basée sur la distribution spatiale des orientations dans les EFs. Celle-ci revient à utiliser le concept de microstructures partielles exposé au chapitre III section III.2.2.3.

Dans une troisième section, nous discutons de la meilleure méthode de distribution des orientations dans le cas où une seule particule Lagrangienne est considérée dans le maillage EF [BER 2004].

Dans une quatrième section, la méthode de distribution la plus appropriée est appliquée à deux cas de déformation hétérogène :

- un cas de compression uniaxiale avec frottement,
- un cas de simulation de procédé de mise en forme : l'emboutissage de coupes cylindriques. Cette deuxième étude a été réalisée par L. Delannay [DEL 2005a].

Dans une cinquième section, nous considérons un nombre p de particules Lagrangiennes dans le maillage EF, et tentons de répondre à la question suivante : est-il utile de considérer un nombre $p>1$ de particules dans le cas des simulations de procédés de mise en forme sans remaillage ? Nous étudions aussi l'influence de la stratégie de couplage utilisée sur la prédiction d'anisotropie mécanique.

Enfin, nous dégagerons les premières conclusions relatives à cette nouvelle méthode.

V.1 Les méthodes de réduction du temps de calcul existantes

Les méthodes existantes pour réduire le temps de calcul des simulations qui nous concernent se classent principalement en deux catégories : les méthodes qui permettent de réduire le nombre d'appels au modèle polycristallin et les méthodes qui se basent sur la réduction du nombre d'orientations cristallographiques pour représenter la texture représentative initiale. Nous ne parlons pas ici du calcul parallèle qui permet de manière évidente de réduire le temps de calcul.

V.1.1 Réduction du nombre d'appels au modèle polycristallin

L'utilisation de la stratégie de couplage faible, comparée à celle de couplage fort, permet de réduire le temps de calcul des simulations, ceci étant essentiellement dû à la réduction du nombre d'appels au modèle polycristallin (cf. chapitre IV section IV.2.2.2.1). Cette stratégie de couplage a déjà été utilisée par Logé pour la simulation du filage en utilisant le modèle polycristallin auto-cohérent de Lebensohn, et une formulation EF eulérienne [LOG 1999].

V.1.2 Réduction du nombre d'orientations cristallographiques nécessaires pour représenter la texture du matériau

Les principales techniques expérimentales utilisées pour mesurer la texture cristallographique d'un matériau sont la diffraction des rayons X et la technique Electron Back Scattered Diffraction (EBSD), ou rétro-diffusion des électrons.

Dans le cas où la texture est mesurée avec la technique EBSD, elle est obtenue sous la forme d'un ensemble discret d'orientations. Une méthode assez aisée que nous proposons pour réduire le nombre d'orientations représentatives de la texture, basée sur un principe de dichotomie, est la suivante :

- 1) choix aléatoire d'un certain nombre d'orientations (environ 1000). Les mesures réalisées comptent souvent beaucoup plus d'orientations.
- 2) comparaison de la texture représentée par ces orientations et celle mesurée expérimentalement. Si la texture est comparable, nous essayons de choisir moins d'orientations, sinon nous augmentons le nombre d'orientations choisies. On peut aussi faire tourner le modèle polycristallin découplé en choisissant des modes de sollicitations variables et comparer les résultats obtenues en terme de comportement mécanique avec la texture complète et la texture réduite.

Dans le cas où la texture est mesurée par diffraction des rayons X, elle est souvent représentée sous la forme d'une fonction de distribution des orientations (FDO) continue. Les différentes stratégies de couplage EF / modèle polycristallin utilisant en général une représentation discrète de la texture cristallographique, il est donc nécessaire de discrétiser la FDO.

Nous allons citer quelques méthodes permettant de discrétiser la FDO, et notamment de sélectionner un nombre d'orientations minimal. Nous ne nous étendons pas sur le sujet puisque, dans le cadre de notre travail, la technique expérimentale utilisée est la technique EBSD. Ensuite, nous présentons la méthode de composante de texture et son application à un cas de procédé de mise en forme. Nous verrons qu'elle permet de réduire le nombre d'orientations à considérer pour représenter correctement la texture du matériau.

V.1.2.1 Les méthodes de discrétisation de texture à partir de la FDO

L'obtention d'un nombre discret d'orientations cristallographiques, avec des fractions volumiques associées, n'est pas une procédure triviale. Une première méthode, « Cutting Method », consiste à supprimer les orientations qui n'ont pas donné, lors des mesures par RX, une intensité supérieure à un certain seuil. Cette méthode ne donne pas toujours de bonnes représentations. D'autres méthodes, un peu plus complexes, sont apparues [TOT 1992]. La principale préoccupation de ces différents auteurs est de limiter les « fantômes » de texture et d'éviter au maximum de supprimer des orientations. Une fois la texture discrétisée, l'ensemble des orientations retenues est utilisé à chaque point d'intégration du maillage EF. Généralement, la texture discrétisée compte en moyenne 1000 orientations.

V.1.2.2 Application originale de la méthode de la composante de texture

L'idée de base de la méthode de composante de texture est l'approximation de textures sous la forme d'une FDO (fonction de distribution des orientations) par un ensemble discret de fonctions de distribution (appelées composantes de texture) définies dans l'espace des orientations. Cette méthode a été étudiée par Lücke et al. [LUC 1981, 1986] et plus tard simplifiée et implémentée dans un programme par Helming [HEL 1994].

L'expression de la FDO *f(g)* à l'aide des fonctions de composantes de texture $f^c(g)$ est de la forme :

$$f(g) = F + \sum_{c=1}^{C} I^c f^c(g) = \sum_{c=0}^{C} I^c f^c(g) \qquad (V.1)$$

avec $I^0 = F$ et $f^0(g) = 1$

où *g* est l'orientation cristallographique et *F* la proportion de cristaux orientés aléatoirement.
F peut être interprétée comme l'intensité de la composante globale. I^c décrit la fraction volumique de tous les cristaux appartenant à la composante *c* et $f^c(g)$ décrit la densité d'orientations de la composante *c*.

Helming [HEL 1996] utilise deux types de fonctions modèles pour $f^c(g)$: les composantes fibres et les composantes sphériques. Les composantes fibres sont caractérisées par l'axe de la fibre f^c et la largeur de diffusion a^c et les composantes sphériques par leur orientation préférentielle g^c et la largeur de diffusion b^c.
Dans les deux cas, une distribution de Gauss est utilisée pour décrire $f^c(g)$:

$$f^c(g) = \frac{e^{S^c \cos(w^c)}}{I_0(S^c) - I_1(S^c)} \qquad (V.2)$$

où I_0 et I_1 sont les fonctions de Bessel généralisées et S^c est définie comme :

$$S^c = \frac{\ln(2)}{1 - \cos(\frac{a^c}{2})} \qquad (V.3).$$

Pour les composantes sphériques, a^c est égale à b^c, et w^c représente la distance d'orientation $f(g, g^c)$.

Après avoir représenté la texture initiale du matériau à l'aide de composantes de textures, il faut intégrer cette information dans le code EF. Nous allons indiquer la procédure utilisée par Raabe et al. [RAA 2005] dans le cas particulier où la texture initiale du matériau est représentée par une seule composante de texture sphérique *c*.

Cette procédure est indépendante du nombre de points d'intégration du maillage EF et se fait en deux étapes (illustrées Figure V.1) :

- l'orientation préférentielle g^c décrite sous la forme des 3 angles d'Euler $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ est distribuée à tous les points d'intégration du maillage EF.
- l'orientation de tous les points d'intégration est ensuite modifiée de telle sorte que sur l'ensemble de tous les points d'intégration du maillage EF, on retrouve $f^c(g)$.

  En fait, la diffusion d'orientation b^c est représentée dans le maillage EF par un ensemble d'orientations systématiquement réorientées afin de reproduire la diffusion sphérique d'origine prescrite par la composante *c*.

Dans certains cas, une autre étape est utilisée pour rendre compte de la composante de texture dite « aléatoire » qui correspond aux orientations cristallographiques n'ayant pas pu être prises en compte lors de la représentation de la texture du matériau par la composante de texture *c* : une ou plusieurs orientations parmi les orientations dites « aléatoires » représentées sous la forme du triplet d'angles d'Euler peuvent alors être assignées à chaque point d'intégration.

Cette méthode permet de réduire le temps de calcul des simulations puisqu'elle considère un nombre restreint d'orientations cristallographiques en chaque point d'intégration du maillage EF (en général 20 orientations différentes d'un point d'intégration à l'autre). Ce nombre est égal à la somme du nombre d'orientations nécessaires pour représenter correctement les composantes de textures et pour décrire la composante de texture dite « aléatoire ». La texture globale est décrite lorsque l'on représente la texture sur l'ensemble des points d'intégration du maillage EF. Cette approche illustre l'utilisation d'un nouveau concept qui consiste à avoir une texture partielle en chaque point d'intégration du maillage. Elle a principalement été utilisée pour la simulation de l'emboutissage [RAA 2005] et permet d'obtenir des résultats corrects. Il a été montré que, selon les composantes de texture considérées, le nombre de cornes d'emboutissage n'est pas le même. L'incorporation d'une

composante de texture aléatoire permet de mieux rendre compte des effets de l'évolution de texture lors de la mise en forme.

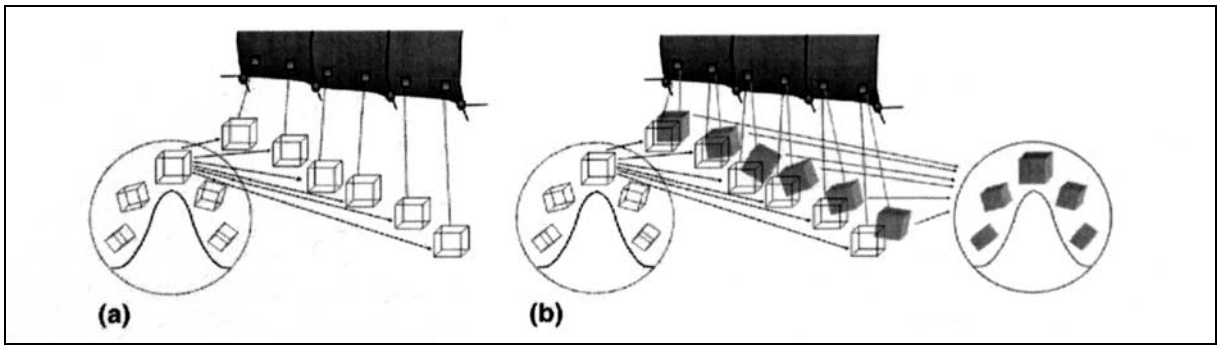


Figure V.1: *Présentation schématique des deux étapes requises pour représenter une composante de texture sur les points d'intégration [RAA 2005]:*
(a) dans la première étape, l'orientation préférentielle g^c (orientation du centre) de chaque composante de texture est assignée en chaque point d'intégration du maillage EF,
(b) dans la deuxième étape, les orientations sont réorientées de façon à ce que leur distribution reproduise la fonction de texture qui était à l'origine prescrite sous la forme d'une composante de texture Gaussienne.

V.2. Une nouvelle méthode de réduction du temps de calcul : la distribution spatiale des orientations dans le maillage EF

Nous présentons la nouvelle méthode que nous avons mise en place dans le cadre de la thèse. Cette méthode se base sur le même concept que l'application de la composante de texture (cf. V.1.2.2) dans la mesure où les informations de la texture globale sont distribuées sur le maillage entier, chaque point d'intégration du maillage ne contenant qu'une partie de ces informations. La principale différence entre ces deux méthodes est la représentation de la texture initiale. Dans notre cas, la texture initiale est représentée par un ensemble d'angles d'Euler discrétisant la texture alors que dans le cas de la méthode de Raabe et al. [RAA 2005] (cf. V.1.1.2.2.), la texture initiale est décrite sous la forme de composantes de texture. Par ailleurs, dans notre cas, la texture n'est pas forcément distribuée sur l'ensemble du maillage. Un groupe d'éléments finis (localisés autour d'une particule Lagrangienne) contigus permet de reconstituer la texture sur une partie du maillage.

V.2.1 Principe général

Distribuer une même texture en chaque point d'intégration du maillage EF consiste à considérer k textures dans le maillage où k est le nombre de points d'intégration du maillage. Chaque texture contient un ensemble N d'orientations cristallographiques, égal au nombre d'orientations cristallographiques de la texture initiale. La méthode que nous proposons consiste à distribuer T textures dans le maillage EF avec $T < k$.
Pour cela, nous avons étudié deux façons de distribuer l textures dans le maillage :

- la méthode de distribution constante
- la méthode de distribution selon le volume des éléments.

Les deux méthodes de distribution sont présentées dans le cas particulier où la texture initiale du matériau est représentée par un ensemble discret d'orientations de même poids.
Le principe général de la méthode est illustré Figure V.2.

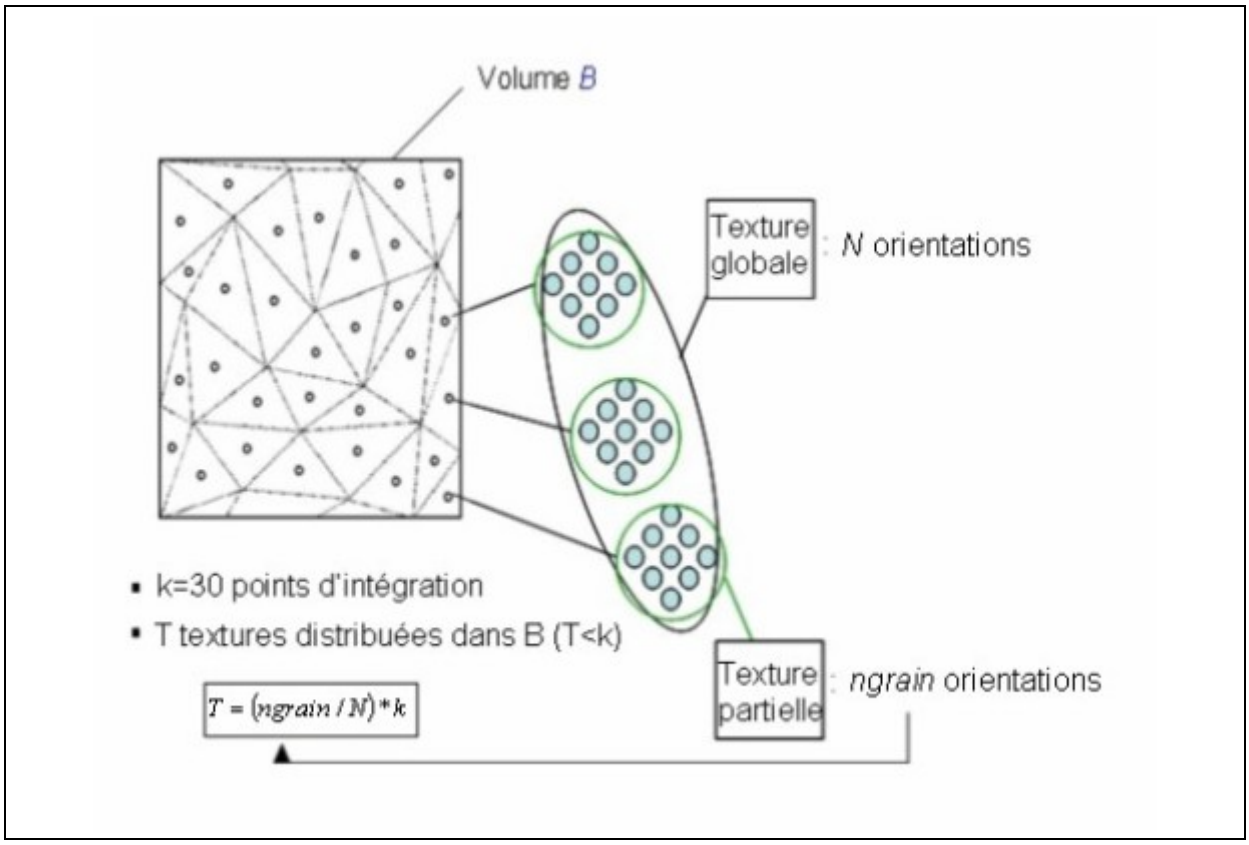


Figure V.2 *Schéma représentant le principe de la méthode de distribution des orientations dans un maillage composé de 30 points d'intégration.*

V.2.2 La méthode de distribution constante

La méthode de distribution constante consiste à distribuer un nombre fixe *ngrain* d'orientations cristallographiques par EF défini par la relation suivante :

$$ngrain = E(\frac{T * N}{k}) \qquad (V.4)$$

où *E( )* est la fonction partie entière, *T* le nombre de textures distribuées dans le maillage EF, *N* le nombre d'orientations cristallographiques de la texture initiale. Dans le cas où la texture initiale contient *N* orientations, nous aurons nécessairement $ngrain < N$ puisque nous avons supposé *T<k*, *k* étant égal dans notre cas au nombre d'EFs dans le maillage. Pour les cas étudiés dans la suite, *T*N* sera toujours un multiple de *k* et on aura donc toujours : $k * ngrain = T * N$.

V.2.3 La méthode de distribution selon le volume

La méthode de distribution selon le volume consiste à distribuer un nombre d'orientations cristallographiques différent dans chaque EF *e*, $ngrain_e$. Ce nombre est proportionnel au nombre $ntot$ d'orientations cristallographiques total dans le maillage, au volume V_e de l'EF *e* et inversement proportionnel au volume total du maillage V_{tot} à l'aide de la relation suivante :

$$ngrain_e = \frac{ntot * V_e}{Vtot} \qquad (V.5)$$

où $$ntot = T * N \qquad (V.6).$$

Comme $ngrain_e$ doit être un nombre entier, nous mettons en place l'algorithme suivant décrit étape par étape :

1- nous affectons, à chaque EF *e*, $E(ngrain_e)$ orientations cristallographiques où $ngrain_e$ est défini par la relation (V.5)
2- nous classons les EFs selon les valeurs décroissantes de ($ngrain_e - E(ngrain_e)$)
3- nous calculons le nombre de grains restant à distribuer $nres$ où :

$$nres = ntot - \sum_e E(ngrain_e) \quad (V.7)$$

On remarque que : $nres < k$.

4- nous distribuons une orientation cristallographique en plus aux $nres$ premiers EFs classés à l'étape 2.

Cet algorithme permet de distribuer un nombre d'entier d'orientations cristallographiques par EF quasi-proportionnel au volume de l'EF aux arrondis près (cf. étapes 1 et 4 du procédé de distribution). Ainsi, la méthode de distribution selon le volume permet de considérer quasiment la même fraction volumique pour toutes les orientations cristallographiques. Notons bien que cette fraction volumique est liée, généralement, à la fois au poids des orientations distribuées sur un élément donné, et au volume considéré. Si les poids sont tous identiques et égaux à l'unité comme dans notre cas, seuls les volumes des éléments comptent. Dans le cas où les orientations seraient variables, les procédures de distribution décrites ci-dessus seraient plus complexes.

Nous allons dans un premier temps comparer ces deux méthodes afin de discuter de leur validité et de leurs défauts dans un cas de déformation homogène.

V.3 Etude des deux méthodes de distribution des orientations dans les EFS et choix d'une méthode [BER2004]

V.3.1 Présentation des simulations

Pour comparer ces deux méthodes de distribution, nous utilisons le couplage fort EF/ modèle polycristallin élasto-viscoplastique de Taylor [DEL 2005b].

Les paramètres sont les mêmes que ceux de la simulation de la « simulation cube Taylor-Fort » exposés au chapitre précédent (cf. chapitre IV section IV.2.1.1) :

- les paramètres du modèle polycristallin,
- le maillage du cube représenté par 48 EFs (cf. Figure IV.9),
- une texture initiale composée de 1200 orientations cristallographiques (cf. Figure IV.8) et,
- une compression uniaxiale selon l'axe z de 60% avec un contact glissant.

Les paramètres variables sont de deux sortes :

- la distribution utilisée, constante (notée *C*) ou selon le volume (notée *V*),
- le nombre de textures distribuées dans le maillage. Les différents nombres de textures étudiés sont répertoriés dans le Tableau V.1 ainsi que le nombre moyen *n* d'orientations cristallographiques par EF associé qui correspond au nombre : $\frac{TN}{k}$.

Nombre de textures distribuées	1	2	10	48
Nombre moyen d'orientations cristallographiques / EF (n)	25	50	250	1200

Tableau V.1 *Tableau représentant les différents nombres de textures distribuées dans le maillage et le nombre moyen d'orientations cristallographiques par EF.*

V.3.2 Résultats des simulations

Les résultats des simulations sont analysés en termes de temps de calcul, de prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture. Rappelons que la prédiction d'anisotropie mécanique est étudiée à l'aide des rapports d'anisotropie $L1/L2$ et $L1/L3$ calculés sur le maillage entier (éq. IV.38).

Avant de présenter les résultats en fonction des différents nombres de texture considérés, nous allons valider le couplage Forge3® /Modèle polycristallin avec les deux méthodes de distribution dans le cas où le nombre moyen de textures distribuées est égal au nombre de points d'intégration du maillage (soit un nombre moyen d'orientations/EF égal à 1200 qui représente le nombre d'orientations de la texture initiale) en comparant ces simulations au résultat obtenu à l'aide du modèle découplé (cf. chapitre IV section IV.2.1.1).

V.3.2.1 Validation de l'implémentation des deux méthodes de distribution

Les résultats sont reportés Tableau V.2. Nous comparons les résultats obtenus avec *n=1200* à ceux obtenus avec le modèle découplé. Dans le cas de la distribution constante, cela revient donc à considérer exactement une texture initiale par point d'intégration du maillage EF (cf. chapitre IV section IV.2.1). La différence maximale observée pour les simulations est d'environ 6.5% pour le rapport $L1/L3$. Les deux méthodes de distribution donnent donc des prédictions correctes en ce qui concerne l'anisotropie.

n	$L1/L2$	$L1/L3$
Modèle découplé	1.617	5.020
$1200V$	1.575	4.693
$1200C$	1.575	4.694
$250V$	1.574	4.692
$250C$	1.573	4.691
$50V$	1.580	4.704
$50C$	1.581	4.716
$25V$	1.581	4.683
$25C$	1.561	4.646

Tableau V.2 *Rapport d'anisotropie pour différentes valeurs de n nombre moyen d'orientations/EF (V=distribution selon le volume, C= distribution constante)*

La prédiction de texture est elle aussi correcte pour les deux méthodes de distribution comme le montre la comparaison des Figures V.3 et IV.11.

De petites différences sont observées pour les niveaux d'intensité des figures de pôle mais elles sont de l'ordre de 2%. Ces différences sont liées au fait que nous comparons les figures de pôle obtenues pour 1200 orientations cristallographiques dans le cas du modèle élasto-viscoplastique découplé alors que pour les deux méthodes de distribution les figures de pôle représentées contiennent 48 fois plus d'orientations cristallographiques.

De plus, les légères différences au niveau de l'anisotropie mécanique et de la texture sont aussi dues au fait que nous n'avons pas exactement une déformation homogène dans le maillage EF car

nous avons très peu d'éléments finis dans le maillage (Figure IV.9) et que nous avons choisi un cube, comme nous l'avions déjà signalé en section IV.2.1.2.

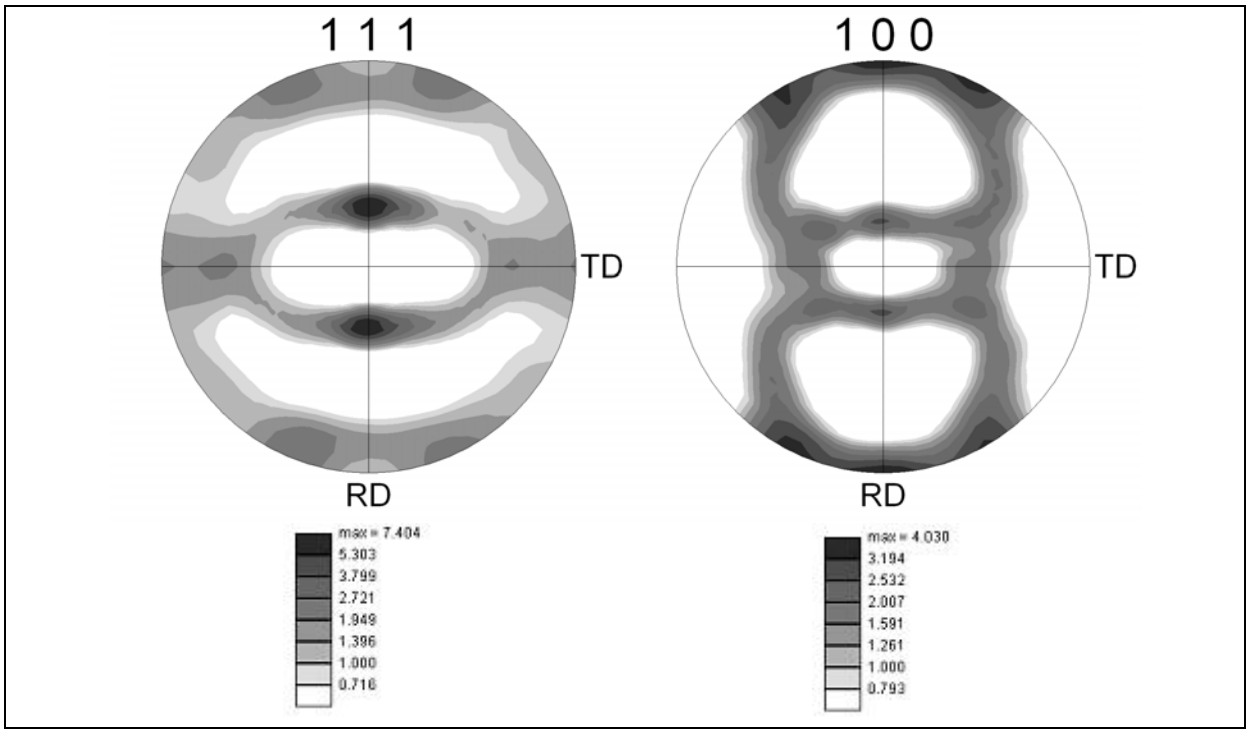


Figure V.3 *Figures de pôle {111} et {100} pour la simulation avec la distribution en volume et 1200 orientations en moyenne/ EF. ND est l'axe de compression z du cylindre, RD est x et TD est y.*

V.3.2.2 Evolution de texture et prédiction d'anisotropie selon les différents nombres de textures distribuées et la méthode de distribution utilisée.

Les résultats concernant la prédiction d'anisotropie sont reportés Tableau V.2 en fonction de la méthode de distribution utilisée (*V* ou *C*) et le nombre moyen *n* d'orientations cristallographiques par EF. Nous comparons cette fois les résultats obtenus pour les différentes valeurs de *n* à ceux obtenus pour $n = 1200$ et la distribution constante qui revient à considérer une texture initiale par EF. Tous les résultats sont très similaires. Nous obtenons une différence maximale de 0.3% pour la distribution selon le volume ($L1/L2, n = 25$) et de 1.01% pour la distribution constante ($L1/L3,\ n = 25$). Notons que le cas n=25 correspond à la distribution d'une seule texture dans le maillage EF.

D'autre part, l'évolution de texture est correctement prédite pour toutes les simulations avec la distribution selon le volume. La différence maximale est obtenue pour la simulation avec $n = 25$, mais elle reste très petite lorsque l'on compare les Figures V.3 et V.4. Pour la distribution constante, la prédiction est correcte pour toutes les simulations excepté celle avec $n = 25$. En comparant les Figures V.3 et V.4, nous voyons que, dans le cas $n = 25$, la figure de pôle {1,1,1} a tourné autour de ND d'un angle d'environ 6°.

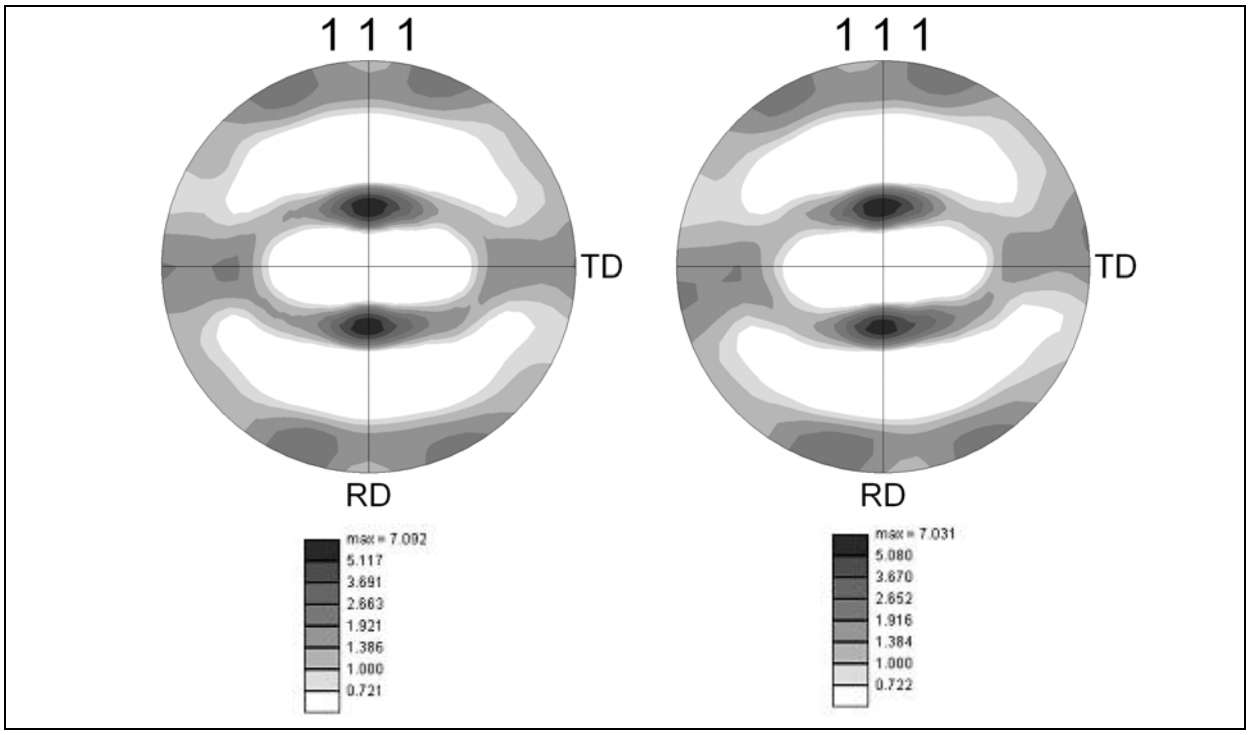


Figure V.4 *Figures de pôle {111} pour* $n = 25$*, pour la distribution en volume (à gauche) et pour la distribution constante (à droite). ND est l'axe de compression z du cylindre, RD est x et TD est y.*

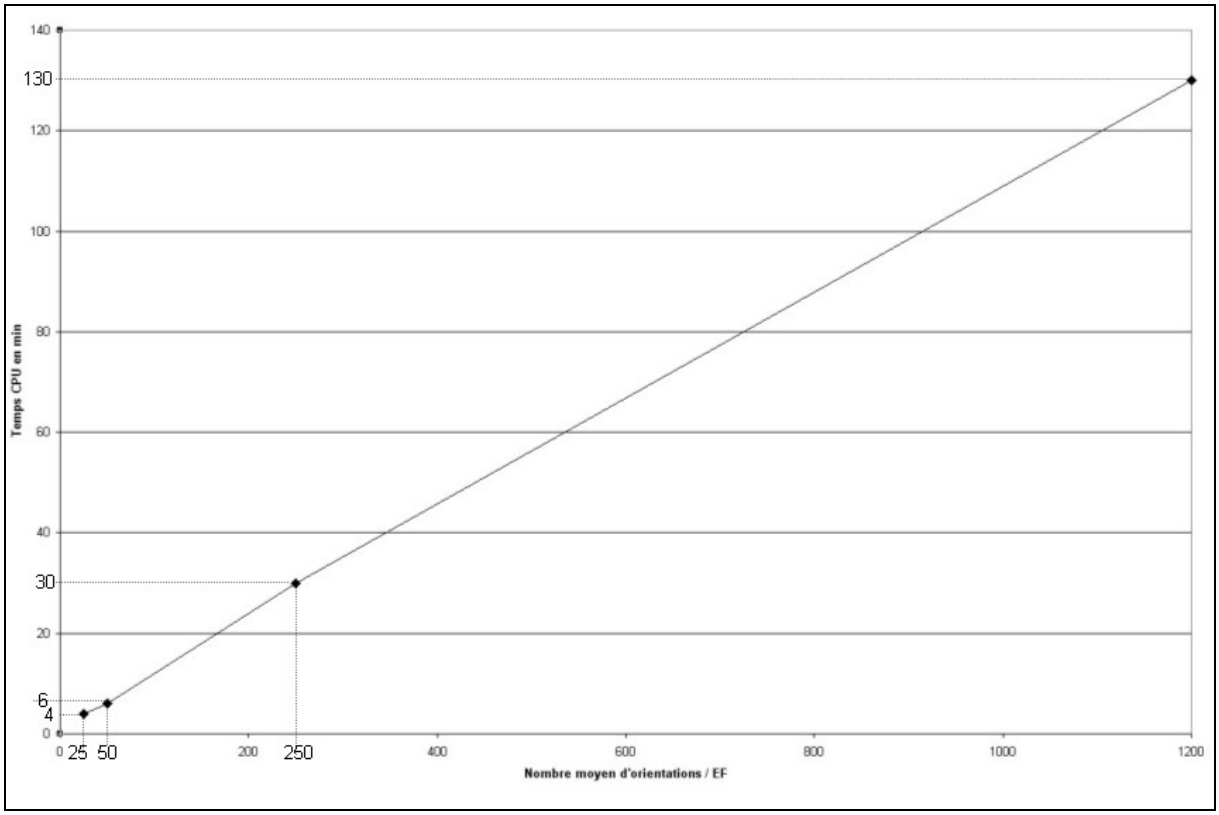


Figure V.5 *Temps CPU en min pour différentes valeurs de n nombre moyen d'orientations cristallographiques /EF dans le cas de la distribution selon le volume avec un Pentium IV (2.4 GHz).*

V.3.2.3 Temps de calcul des simulations

Le temps de calcul des simulations augmente avec le nombre moyen *n* d'orientations cristallographiques par élément fini. Le temps de calcul est reporté Figure V.5 dans le cas de la distribution selon le volume. Il n'est pas exactement proportionnel au nombre d'orientations dans le maillage. Ceci est dû sans doute au fait que chaque EF contient un ensemble différent d'orientations cristallographiques pour les différents cas testés, modifiant la convergence du modèle polycristallin et celle de la procédure itérative de Newton-Raphson lors de la résolution mécanique sur les EFs.

V.3.3 Discussion préliminaire

Cette étude montre que distribuer spatialement *l* textures dans le maillage avec *l* strictement inférieur au nombre de points d'intégration dans le maillage EF permet de prédire correctement l'anisotropie mécanique ainsi que l'évolution de texture, lorsqu'un nombre suffisant d'orientations cristallographiques par EF est distribué.

Nous étudions l'écart-type relatif du poids de l'ensemble des orientations cristallographiques distribuées dans le maillage EF, afin de connaître dans quelle mesure nous nous écartons de la description de la texture initiale pour laquelle toutes les orientations cristallographiques ont le même poids. Le poids d'une orientation cristallographique *i* appartenant à l'EF fini *e* est calculé comme suit :

$$poids(i) = \frac{V_e}{ngrain_e \quad V_{tot}} \qquad \text{(V.8)}$$

où V_e est le volume de l'EF *e*, $ngrain_e$ le nombre d'orientations dans l'EF *e* et V_{tot} le volume total du maillage.

L'écart-type relatif du poids de l'ensemble des orientations dans le maillage initial noté *ETR* est :

$$ETR = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{ntot} \frac{(poids(i) - poidsmoyen)^2}{ntot}}}{poidsmoyen} \qquad \text{(V.9)}$$

avec

$$poidsmoyen = \frac{\sum_{i=1}^{ntot} poids(i)}{ntot} = \frac{1}{ntot} \qquad \text{(V.10)}$$

où *ntot* est le nombre total d'orientations distribuées dans le maillage EF (cf. Equation V.6).
Dans le cas de la distribution constante, *ETR* est le même pour toutes les simulations et est égal à 0.048. Il correspond à l'écart-type relatif des volumes des EFs. Dans le cas de la distribution selon le volume, *ETR* varie d'une simulation à l'autre et représente l'erreur d'arrondi commise lors de la distribution selon le volume. Les valeurs de *ETR* sont représentées Figure V.6 en fonction du nombre moyen d'orientations *n*. L'erreur d'arrondi augmente lorsque *n* diminue.

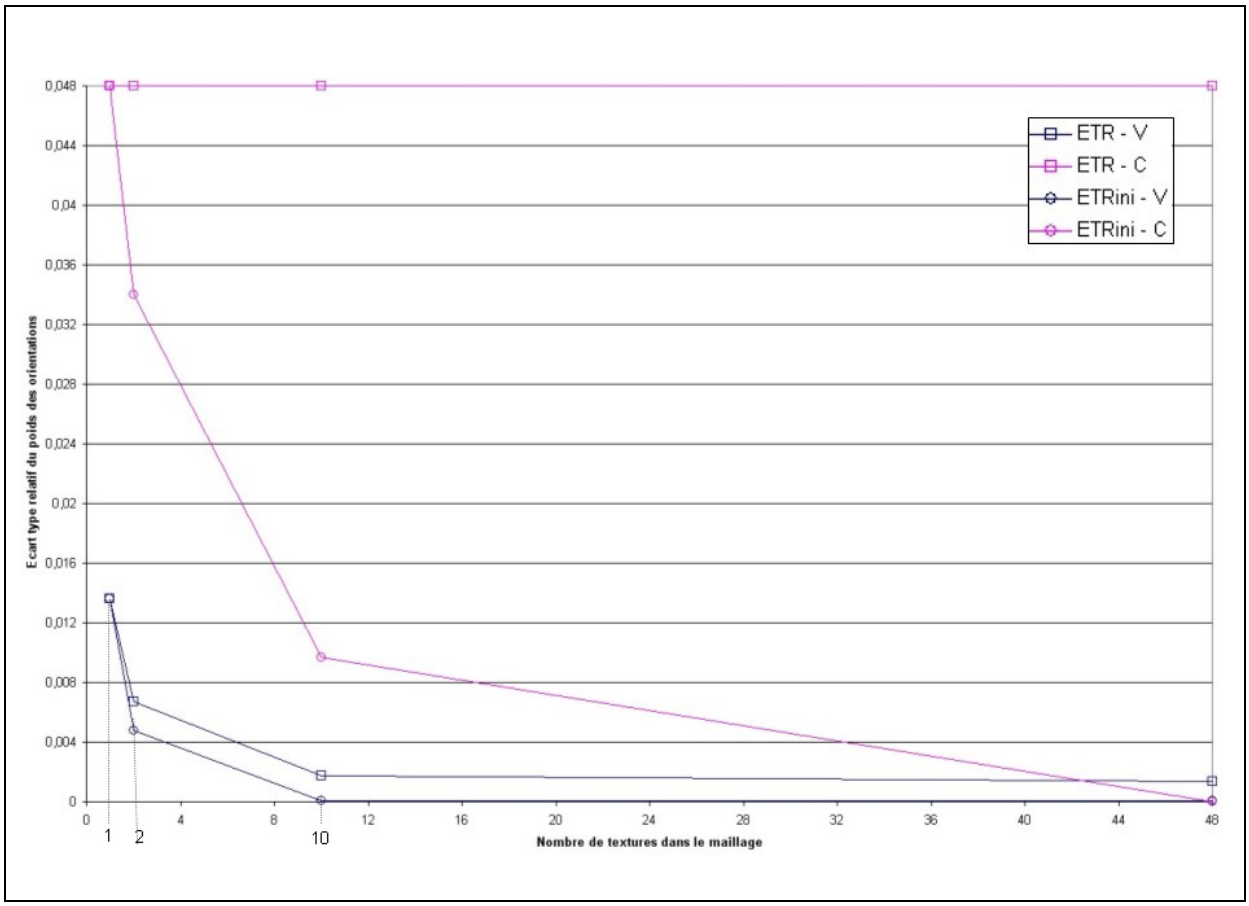


Figure V.6 *Ecart type relatif du poids des orientations (ETR) et écart-type relatif du poids des orientations de la texture initiale (ETRini) en fonction de la méthode de distribution (C=constante et V=volume) et du nombre de textures initiales distribuées dans le maillage.*

Les erreurs relatives des rapports L1/L2 et L1/L3 par rapport au cas où une texture est considérée par EF sont reportées Figure V.7 en fonction de la méthode de distribution et du nombre de textures initiales distribuées dans le maillage EF. Pour la distribution selon le volume, les erreurs relatives augmentent lorsque *n* diminue et l'*ETR* augmente. Pour la distribution constante, les erreurs relatives augmentent lorsque *n* diminue alors que l'*ETR* est constant. Excepté dans le cas où *n=1200*, les erreurs relatives sont toujours légèrement plus élevées pour la distribution constante en comparaison à celles obtenues pour la distribution selon le volume. Cette erreur est beaucoup plus élevée dans le cas où *n=25*, car, comme expliqué à la page précédente, la texture initiale est de moins en moins bien représentée.

Lorsque plusieurs textures sont distribuées dans le maillage (dans les cas où *n>25*), une même orientation cristallographique de la texture initiale peut se retrouver à la fois dans un grand et un petit volume. Cela permet, principalement dans le cas de la méthode de distribution constante, de mieux représenter le poids de cette orientation dans le calcul du comportement mécanique, dans la mesure où nous étudions des simulations avec une déformation homogène. Afin de prendre en compte ce paramètre pour l'analyse des résultats, nous étudions l'écart-type relatif du poids de l'ensemble des orientations de la texture initiale (*N* orientations de la texture et non plus *ntot* orientations du maillage) que nous notons *ETRini*. Le poids d'une orientation de la texture initiale est :

$$poids_{textureinitiale}(i) = \sum_{e=1}^{nelt} \frac{(V_e / V_{tot})}{ngrain_e} \chi_e(i) \qquad \text{(V.11)}$$

où *nelt* est le nombre d'éléments dans le maillage, $\chi_e(i)$ vaut 1 si l'orientation *i* appartient à l'élément *e* et 0 sinon, V_e le volume de l'élément fini, V_{tot} le volume du maillage, $ngrain_e$ le nombre d'orientations cristallographiques dans l'élément *e*.
Les écarts types relatifs obtenus pour les différentes valeurs de *n* et les deux méthodes de distribution sont reportés Figure V.6. Pour les deux méthodes de distribution, l'écart-type relatif du poids de l'ensemble des orientations de la texture initiale augmente lorsque le nombre de textures distribuées dans le maillage diminue. Il est inférieur à l'*ETR* quelle que soit la méthode de distribution considérée lorsque l'on distribue plusieurs textures, et égal à l'*ETR* dans le cas où une texture est distribuée dans le maillage EF. Pour la méthode de distribution constante, cet écart-type est plus significatif puisqu'il évolue selon le nombre de textures distribuées et est égal à 0 dans le cas où une seule texture est considérée par EF. Excepté pour le cas où une seule texture est distribuée par EF, l'*ETRini* de la méthode de distribution constante est plus élevé que celui de la méthode de distribution selon le volume, expliquant ainsi les erreurs relatives sur les rapports L1/L2 et L1/L3 (cf. Figure V.7) légèrement plus élevées dans le cas de la méthode de distribution constante.

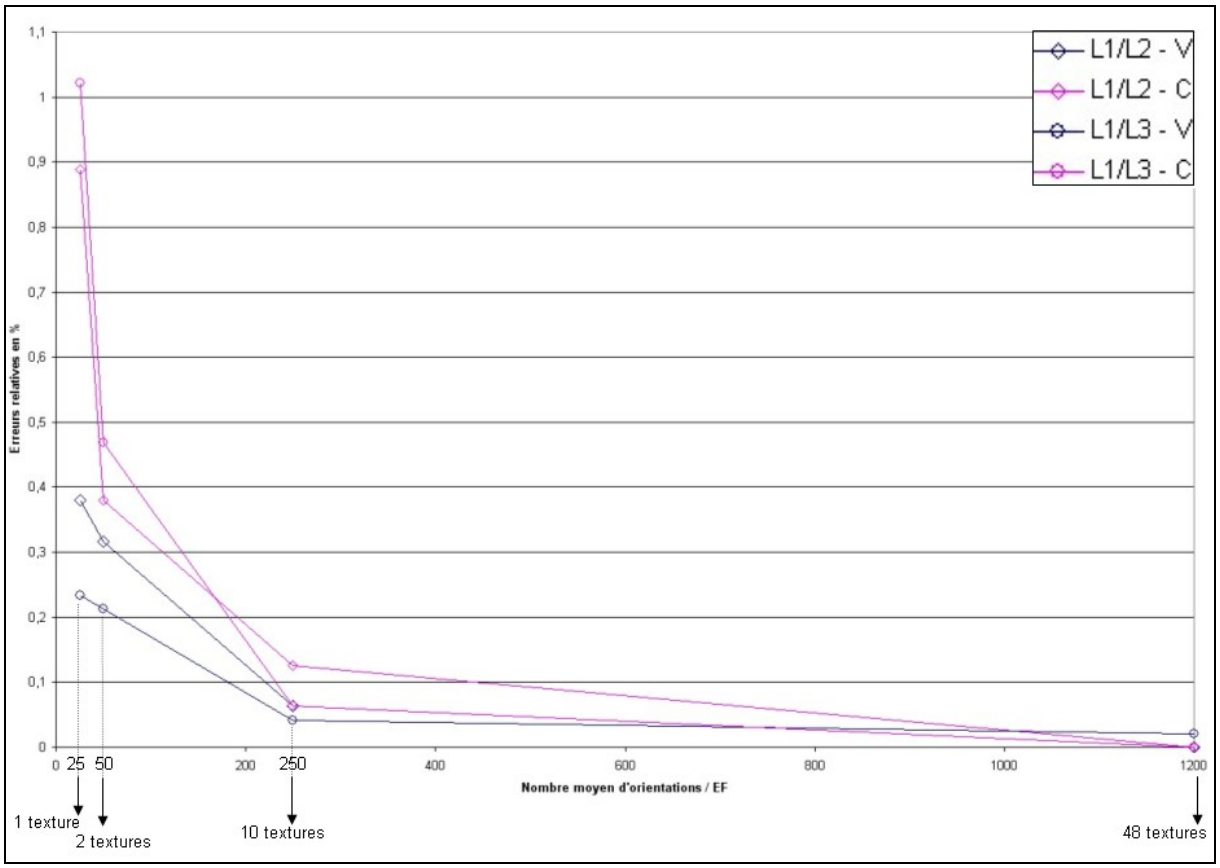


Figure V.7 *Erreurs relatives (en %) des rapports L1/L2 et L1/L3 par rapport au cas où 1 texture est considérée par EF en fonction de la méthode de distribution et du nombre de textures initiales distribuées dans le maillage EF.*

Maintenant que nous avons mis en évidence l'influence de la « représentation de la texture initiale », nous allons analyser l'influence de l'utilisation de textures partielles pour les EFs (au lieu de 1 même texture par EF) sur la déformation. Pour cela, nous considérons la simulation où une texture est distribuée par EF (1200 C) comme la simulation de référence, et nous calculons l'écart-type relatif de la déformation équivalente de la façon suivante :

$$ETRdef^{\,i} = \frac{\sqrt{\frac{1}{nelt}\left(\sum_{elt=1}^{nelt}\left(\varepsilon_{eq}^{i}(elt) - \varepsilon_{eq}^{REF}(elt)\right)^2\right)}}{\varepsilon_{moyen}^{REF}} \quad \text{(V.12a)}$$

$$\text{avec } \varepsilon_{moyen}^{REF} = \frac{1}{nelt}\sum_{elt=1}^{nelt}\varepsilon_{eq}^{REF}(elt) \quad \text{(V.12b)}$$

où *nelt* représente le nombre d'EFs dans le maillage, l'indice *i* représente la simulation considérée et l'indice *REF* représente la simulation de référence, soit dans notre cas « 1200 C » et $\varepsilon_{eq}(elt)$ la déformation équivalente de l'élément *elt*. $\varepsilon_{moyen}^{REF}$ représente la déformation équivalente moyenne (sur tout le maillage) de la simulation de référence.
Pour la simulation de référence considérée, $\varepsilon_{moyen}^{REF}$ est égale à 0.93. Les résultats obtenus pour les différentes simulations sont reportées Figure V.8. Nous remarquons que, excepté pour $n = 25$- distribution constante, *ETRdef* augmente lorsque le nombre moyen d'orientations par EF diminue. Cela signifie que distribuer des textures partielles modifie localement la déformation équivalente sur les EFs, puisque le comportement mécanique est différent d'un élément à l'autre. Distribuer moins d'orientations par EF augmente localement l'écart à la déformation attendue. La méthode de distribution selon le volume permet d'avoir un écart moins important que celui obtenu par la distribution constante.
Dans le cas $n = 25$- distribution constante, l'écart-type de la déformation équivalente aurait logiquement dû être plus élevé que celui obtenu Figure V.8. Ce phénomène peut s'expliquer par le fait que la texture initiale était mal représentée et donc la déformation équivalente obtenue ne peut pas être comparée à celle obtenue dans le cas « 1200 C ».

Au vu de ces premiers résultats, l'écart-type relatif du poids des orientations de la texture initiale semble être un bon paramètre à examiner afin de contrôler l'erreur commise sur la prédiction d'anisotropie mécanique. Cet écart-type relatif est moins élevé dans le cas de la distribution selon le volume que dans celui de la distribution constante, du fait de la construction de la méthode. La distribution selon le volume est donc plus adaptée car elle permet une plus grande réduction du nombre de textures à considérer dans le maillage EF pour une précision donnée. Pour les simulations étudiées ci-dessus, il est possible de considérer une seule texture, mais dans le cas de la distribution constante, la texture initiale et l'évolution de la texture ne sont plus correctement prédites, induisant une erreur relative sur la prédiction d'anisotropie croissante pour un taux de compression du lopin croissant.

Lorsque le maillage ne contient pas des éléments finis de même volume, ce qui est souvent le cas, la distribution selon le volume est à privilégier pour une bonne représentation de la texture initiale.

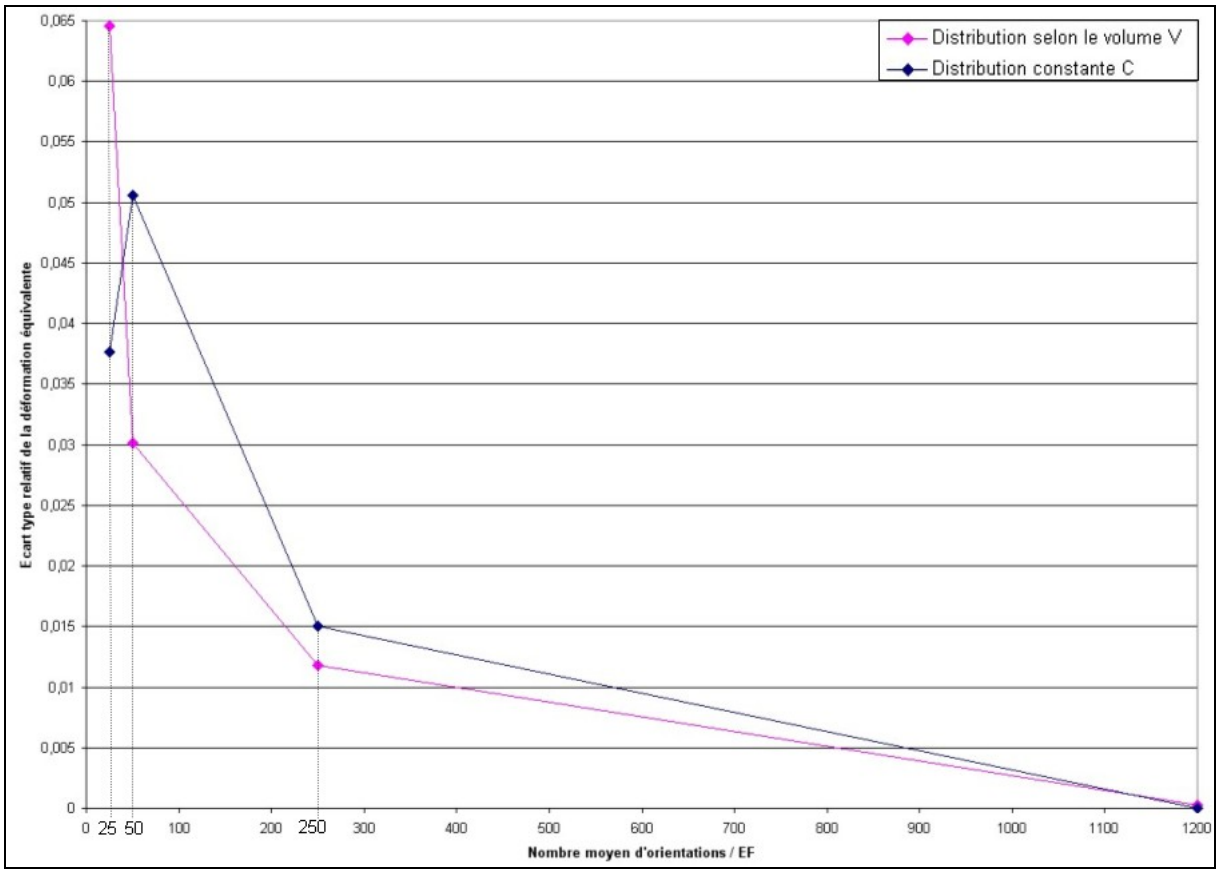


Figure V.8 *Ecart-type relatif de la déformation équivalente par rapport à la simulation « 1200 C » en fonction du nombre moyen d'orientations et de la méthode de distribution utilisée.*

V.3.4 Influence du maillage EF

La méthode de distribution selon le volume permet d'obtenir des résultats satisfaisants pour une seule texture distribuée dans le maillage dans un cas de déformation homogène lorsque le maillage est composé de 48 EFs.

Considérons donc maintenant le cas de la distribution selon le volume avec une seule texture initiale distribuée dans le maillage mais avec un maillage composé de plus d'éléments. Le maillage du cube constitué de 591 EFs tétraédriques est illustré Figure V.9. Les données matériau, mécaniques et géométriques sont les mêmes que précédemment, seul le nombre d'EFs dans le maillage est différent. Le nombre moyen *n* d'orientations cristallographiques par EF est égal à 2 (1200 orientations / 591 EFs).

Les rapports d'anisotropie obtenus sont L1/L2=1.51 et L1/L3=4.66. Si nous comparons ces résultats à ceux obtenus avec le cas où une texture est distribuée par EF, les erreurs relatives pour les rapports L1/L2 et L1/L3 sont respectivement de 4.12% et 0.76%. Ces erreurs sont nettement plus élevées que celles pour le maillage avec 48 EFs (erreur inférieure à 0.3%). L'écart-type relatif du poids des orientations de la texture initiale dans le maillage est de 0.24. Cet écart-type est beaucoup plus élevé que celui de la distribution constante avec une seule texture distribuée (maillage de 48 EFs), ce qui contribue à une plus grande erreur pour l'anisotropie. Notons que l'erreur est comparable à celle obtenue précédemment pour la distribution constante.

Le nombre de textures à distribuer dans le maillage EF dépend donc non seulement de la disparité des volumes dans le maillage EF mais aussi du nombre d'EFs dans le maillage. Il est nécessaire que le nombre moyen d'orientations par EF soit suffisamment élevé afin que les erreurs

d'arrondi liées à la méthode de distribution selon le volume ne viennent pas fausser la description de la texture initiale (tout comme dans le cas de la distribution constante), et donc la prédiction de texture et d'anisotropie mécanique au cours de la déformation.

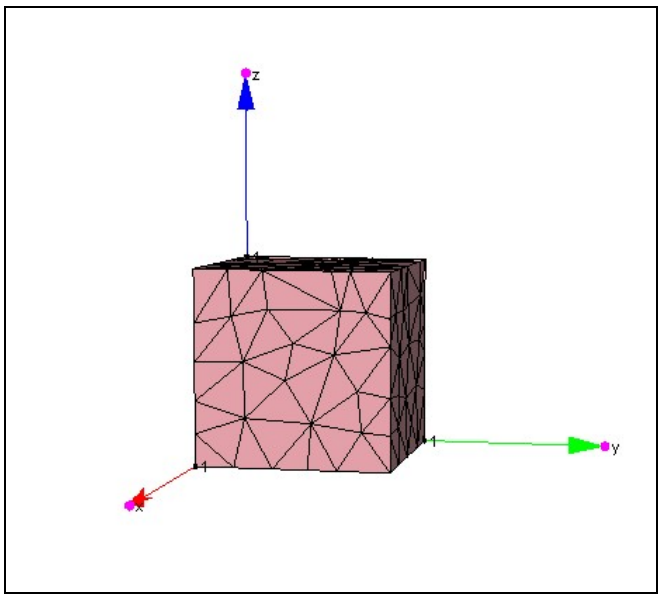


Figure V.9 *Maillage initial du cube composé de 591 EFs tétraédriques.*

V.3.5 Discussion

Distribuer spatialement les orientations cristallographiques sur les EFs du maillage et non plus considérer une seule texture par EF engendre des fluctuations du point de vue du comportement mécanique comme le montre l'étude de l'écart-type de la déformation Figure V.8 et la Figure V.10. La compression du cube étant une compression uniaxiale sans frottement, la déformation devrait être quasi homogène. Dans le cas de la distribution constante et *n=1200*, les légères fluctuations de la déformation équivalente sur les EFs sont dues au fait que nous considérons très peu d'EFs pour mailler la pièce. Cependant, compte tenu du temps de calcul des simulations, nous étions forcés de nous limiter dans un premier temps à ce type de maillage composé de très peu d'EFs. Les fluctuations observées dans le cas de la distribution selon le volume sont liées au fait que les orientations cristallographiques sont différentes d'un EF à l'autre, induisant des comportements mécaniques différents d'un EF à l'autre. Cependant ces fluctuations sont acceptables puisqu'elles permettent de représenter correctement l'anisotropie mécanique.

Nous avons mis en évidence dans cette première étude que distribuer un nombre minimum de textures dans le maillage permet de représenter correctement l'évolution de texture et d'anisotropie lorsque l'on utilise la distribution selon le volume. Cette distribution permet de mieux représenter la texture initiale que la distribution constante.

Cependant, même lorsque l'on utilise la distribution selon le volume, il est impératif de considérer un nombre moyen d'orientations cristallographiques par EF minimum afin que l'erreur d'arrondi liée à la méthode de distribution selon le volume ne vienne pas entacher les résultats. La méthode que nous avons mise en place est sensible au maillage EF (nombre d'EFs et disparité des volumes). Pour connaître le nombre d'orientations à distribuer en moyenne par EF dans un maillage initial donné, la valeur de l'écart-type relatif du poids des orientations de la texture initiale dans le maillage initial est un paramètre à considérer. Cet écart-type relatif doit avoir une valeur maximale de l'ordre de 10^{-2} afin de fournir des prédictions correctes dans le cas de déformation homogène considéré.

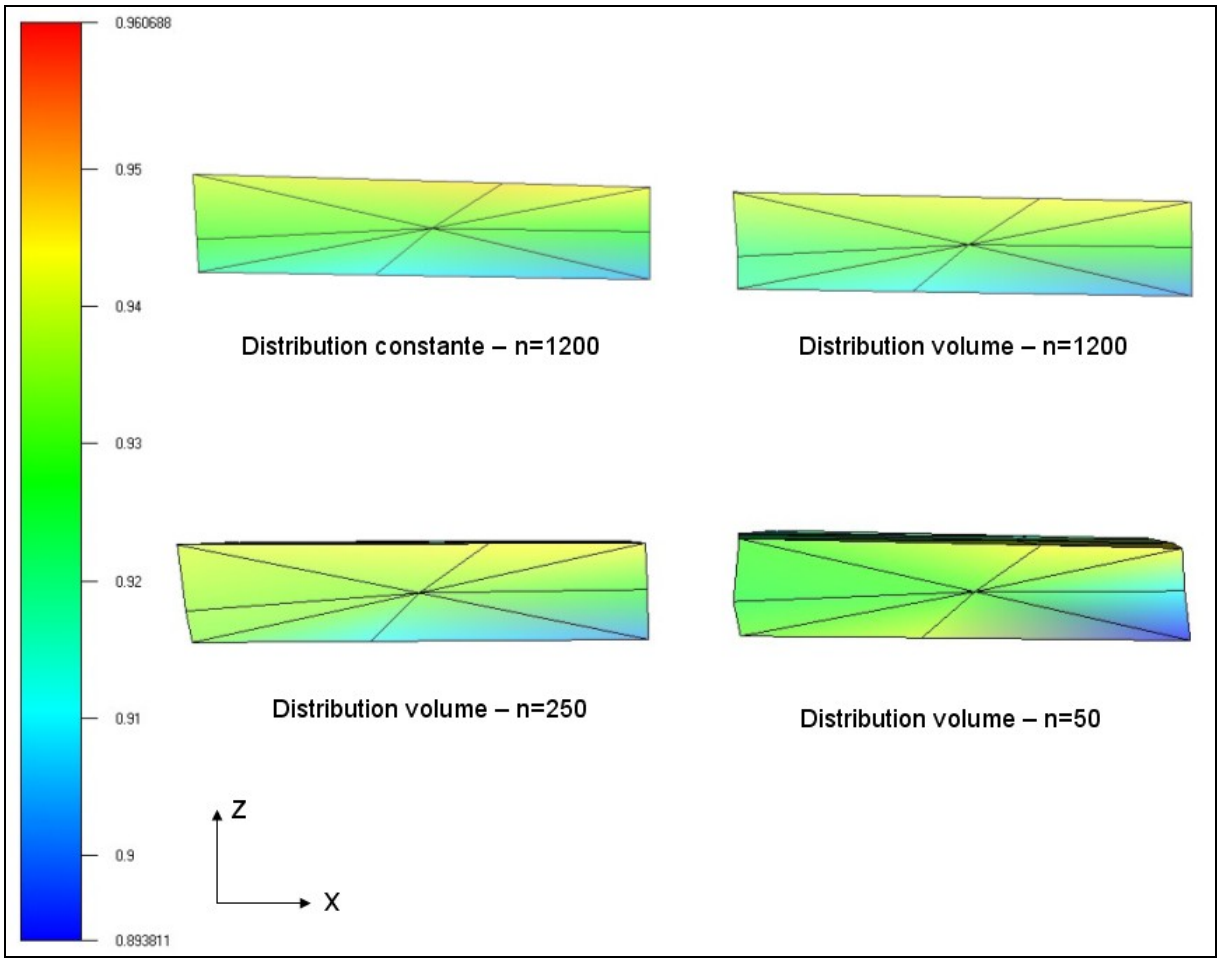


Figure V.10 *Déformation équivalente sur les éléments finis du maillage final selon différentes valeurs du nombre moyen n d'orientations cristallographiques par EF et différentes méthodes de distribution des orientations dans le maillage.*

V.4 Application de la méthode de distribution selon le volume dans un cas de déformation hétérogène avec une seule particule

Nous étudions dans cette section la prédiction d'anisotropie et d'évolution de texture lorsque la méthode de distribution des orientations selon le volume est appliquée à deux cas de déformation hétérogènes :

- la compression uniaxiale de cylindre avec frottement,
- l'emboutissage de coupes cylindriques.

V.4.1 Compression de cylindre avec frottement

V.4.1.1 Présentation des simulations

Nous considérons la simulation du cylindre avec frottement présentée au chapitre IV section IV.2.2.1. Nous allons faire varier le nombre moyen d'orientations par EF dans le maillage et étudier les résultats des simulations en terme de prédiction d'anisotropie et d'évolution de texture dans le maillage entier et dans la zone la plus déformée. La zone la plus déformée est définie de la même façon qu'au chapitre IV section IV.2.2.2.2, c'est-à-dire par les éléments finis du maillage dont la déformation finale est comprise entre 0.7 et 1.1, pour la simulation couplage fort avec une texture par

EF. Cette zone contient 308 EFs. Les nombres moyens d'orientations cristallographiques par EF considérés sont : 100, 50, 25 et 10.

V.4.1.2 Résultats des simulations

V.4.1.2.1 Prédiction de l'anisotropie mécanique

Les résultats en terme de prédiction d'anisotropie sont étudiés à l'aide des deux rapports L1/L2 et L1/L3 (éq. IV.38).
Les résultats de ces rapports obtenus sur le maillage entier sont répertoriés Tableau V.3 selon le nombre moyen d'orientations/EF. Le Tableau V.4 donne les erreurs relatives entre ces rapports et ceux de la simulation de référence qui est la simulation en couplage fort avec une texture par EF (cf . chapitre IV section IV.2.2.2.2) soit un nombre moyen d'orientations par EF de 1200.

n	*L1/L2*	*L1/L3*
1200	1.251	2.662
100	1.255	2.667
50	1.256	2.669
25	1.262	2.672
10	1.263	2.673

Tableau V.3 *Rapport d'anisotropie pour différentes valeurs de n, le nombre moyen d'orientations/EF dans le maillage entier – cas du cylindre avec frottement*

n	*L1/L2*	*L1/L3*
100	0.356	0.174
50	0.438	0.263
25	0.884	0.364
10	0.988	0.401

Tableau V.4 *Erreurs relatives (en %) des rapports d'anisotropie pour différentes valeurs de n, le nombre moyen d'orientations/EF dans le maillage entier par rapport au cas avec une texture initiale par EF – cas du cylindre avec frottement*

L'erreur relative sur les rapports *L1/L2* et *L1/L3* augmente lorsque le nombre moyen d'orientations par EF diminue. La différence maximale obtenue est de 0.988 % pour le rapport *L1/L2* et *n=10*. L'écart-type relatif du poids des orientations de la texture initiale augmente lorsque le nombre moyen d'orientations / EF diminue et traduit les erreurs d'arrondi liées à la méthode de distribution (cf. Tableau V.5). Tous les nombres *n* d'orientations cristallographiques par EF considérés permettent néanmoins d'obtenir des rapports d'anisotropie corrects dans la mesure où l'erreur relative est < 1%.

n	100	50	25	10
Ecart type relatif Maillage initial	5.57 E-03	8.89 E-03	2.27 E-02	2.34 E-02

Tableau V.5 *Ecart type relatif du poids des orientations de la texture initiale (ETRini) en fonction du nombre moyen d'orientations/EF dans le maillage.*

Examinons les rapports d'anisotropie obtenus dans la zone la plus déformée correspondant à la bande de localisation de déformation (Tableau V.6). Dans cette zone, l'erreur relative commise sur les rapports d'anisotropie (Tableau V.7) est plus élevée que celle commise dans le maillage entier. Ceci est lié au fait que dans la zone déformée, il y a seulement 308 EFs et donc beaucoup moins de textures distribuées comme le montre le Tableau V.8. L'erreur la plus importante est là encore obtenue pour le

nombre d'orientations cristallographiques par EF le plus faible qui est de 10. Dans le cas où *n=10*, il y a seulement 3 textures initiales dans cette zone. Néanmoins, la prédiction d'anisotropie mécanique reste correcte dans la mesure où l'erreur relative maximum est de 1.727% dans cette zone, soit moins de 2%.

n	*L1/L2*	*L1/L3*
1200	1.427	3.926
100	1.437	3.946
50	1.444	3.948
25	1.447	3.987
10	1.452	3.984

Tableau V.6 *Rapport d'anisotropie pour différentes valeurs de n nombre moyen d'orientations/EF dans la zone déformée composée de 308 EFs – cas du cylindre avec frottement.*

n	*L1/L2*	*L1/L3*
100	0.702	0.497
50	1.205	0.542
25	1.396	1.550
10	1.727	1.467

Tableau V.7 *Erreur relative (en %) des rapports d'anisotropie pour différentes valeurs de n nombre moyen d'orientations/EF dans la zone déformée composée de 308 EFs par rapport au cas avec couplage fort et 1 texture/EF – cas du cylindre avec frottement.*

n	1200	100	50	25	10
Nombre d'orientations cristallographiques	369600	35792	17898	8945	3572
Nombre moyen de texture initiale	308	30	15	7	3

Tableau V.8 *Nombre d'orientations cristallographiques dans la zone déformée composée de 308 EFs pour les différentes valeurs de n nombre moyen d'orientations cristallographiques/EF.*

V.4.1.2.2 Prédiction de l'évolution de texture cristallographique

La prédiction de l'évolution de la texture cristallographique est examinée pour les différentes valeurs de *n*, nombre moyen d'orientations cristallographiques par EF.

L'évolution de la texture cristallographique est correctement prédite dans le maillage entier pour toutes les valeurs de *n* comme le montre la comparaison des Figures IV.16 (*n=1200*) et V.10 (*n=10*). Le niveau des pics d'intensité est lui aussi correctement prédit.

Examinons maintenant l'évolution de texture dans la zone la plus déformée. Nous observons de légères différences au niveau de la forme des figures de pôle uniquement pour le cas *n=10* (comparaison des Figures IV.18 et V.11). Ces différences sont liées au fait que dans la simulation avec *n=10*, il y a seulement 3 textures initiales dans la zone la plus déformée.

La représentation des textures à l'aide de textures partielles dans le maillage nécessite donc un nombre suffisant d'orientations cristallographiques dans les zones où nous voulons connaître l'évolution de texture cristallographique, et ceci d'autant plus que les déformations y sont hétérogènes.

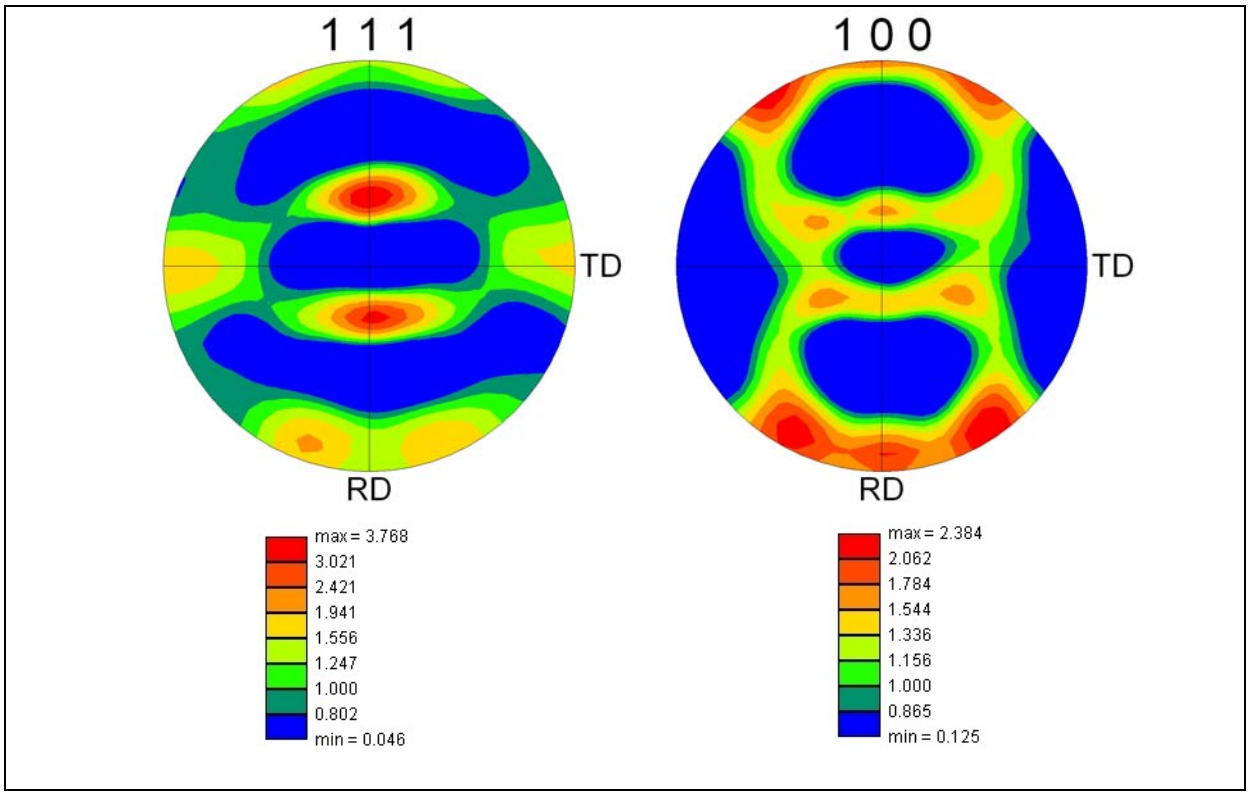


Figure V.11 *Figures de pôle {111} et {100} sur le maillage entier pour n=10. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

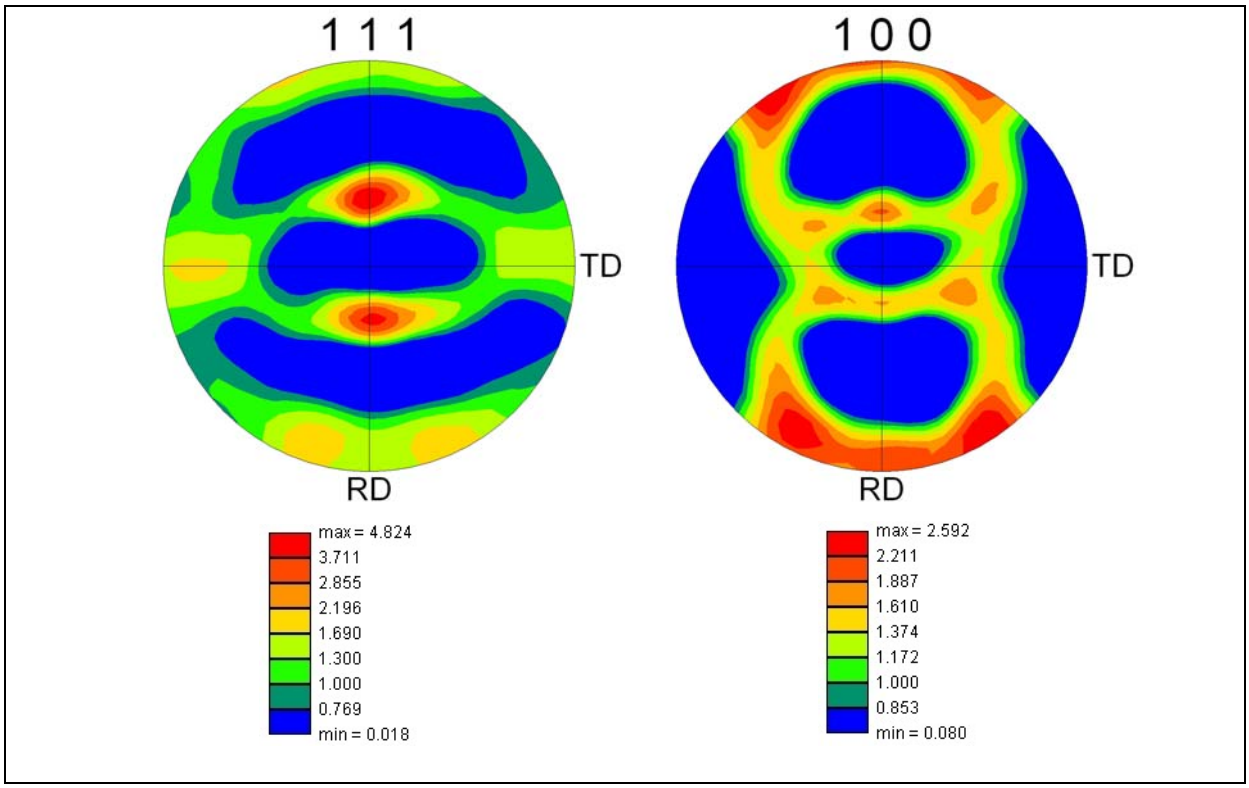


Figure V.12 *Figures de pôle {111} et {100} sur la zone déformée composée de 308 EFs pour n=10. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

V.4.1.3 Temps de calcul des simulations

Le temps de calcul des simulations est reporté Tableau V.9. Nous voyons que, excepté pour le cas où *n=10*, le temps de calcul des simulations diminue lorsque *n* diminue. Pour la simulation avec *n=100*, le temps de calcul est réduit d'un facteur de 11.43 par rapport à *n=1200*. Le temps de calcul n'est pas exactement proportionnel au nombre d'orientations dans le maillage car les simulations ont été menées à l'aide de la stratégie de couplage fort. Le temps de calcul dépend de la convergence de l'algorithme de Newton-Raphson et ainsi du nombre d'appels du modèle polycristallin par incrément de temps.

Simulations	*n=1200*	*n=100*	*n=50*	*n=25*	*n=10*
Temps CPU	55h40min	4h52min	2h09min	1h48min	2h38min

Tableau V.9 *Temps CPU de la simulation de compression uniaxiale du cylindre en fonction de n, le nombre moyen d'orientations cristallographiques par EF avec un Pentium IV (1.8 GHz).*

Il est intéressant de voir que diminuer le nombre d'orientations par EF ne diminue pas nécessairement le temps de calcul des simulations, la convergence étant parfois plus difficile. Ceci est lié au fait que moins le nombre d'orientations par EF est élevé, plus l'anisotropie locale est importante et varie beaucoup d'un élément à l'autre. De plus, le maillage dégénère alors plus rapidement. Ces deux facteurs contribuent à une convergence moins rapide. La Figure V.13 illustre le facteur de forme volumique pour le maillage final en fonction des différentes valeurs de *n*. Nous voyons que pour *n=1200* et *n=100*, le facteur de forme volumique varie quasiment entre les mêmes bornes, la borne inférieure étant de l'ordre de 10^{-3}. Dans les cas *n=25* et *n=10*, la borne inférieure est de l'ordre de 10^{-5}. Il apparaît donc clairement, au vu des facteurs de forme volumique des éléments finis dans le maillage final, que les éléments finis tendent à dégénérer. Il paraît donc indispensable de mettre en place le remaillage.

V.4.1.4 Conclusion

La méthode de distribution selon le volume permet de réduire le temps de calcul des simulations. Cependant, le temps de calcul (vitesse de convergence) dépend de la variabilité des comportements mécaniques d'un élément à l'autre, et aussi de la qualité géométrique des éléments finis dans le maillage.

Les EFs du maillage tendent à dégénérer pour plusieurs raisons :

- la texture initiale orientée tend à allonger les éléments finis dans une certaine direction,
- la distribution des orientations sur les EFs génère localement des anisotropies différentes d'un élément à l'autre dans la mesure où les orientations cristallographiques considérés d'un EF à un autre sont différentes,
- les taux de compression peuvent être élevés.

Lors de ces simulations, le remaillage peut donc s'avérer nécessaire.

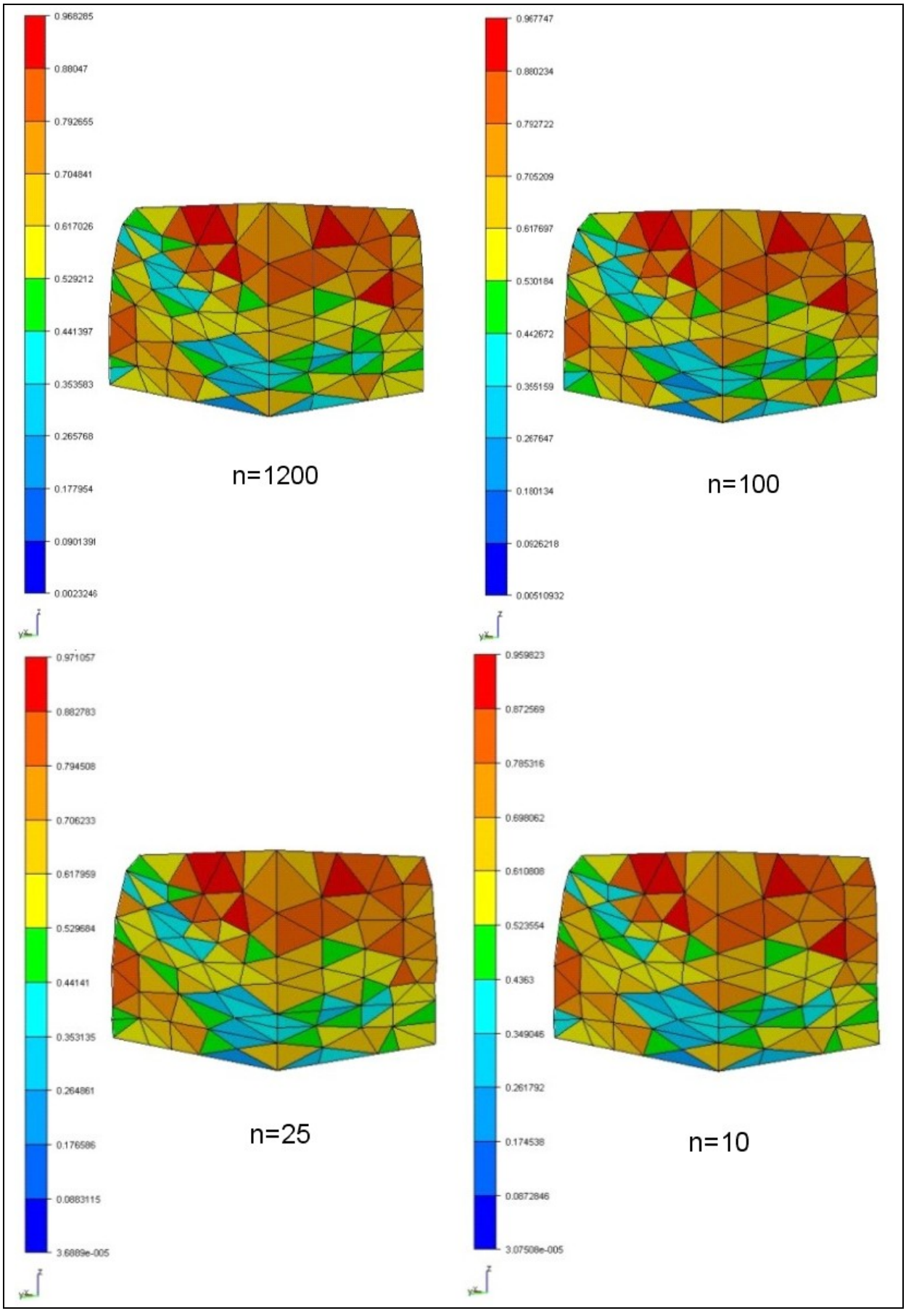


Figure V.13 *Facteur de forme volumique pour le maillage finale selon différentes valeurs de n.*

V.4.2 Application de la méthode de distribution selon le volume à un procédé de mise en forme : l'emboutissage de coupes cylindriques. Etude menée par L. Delannay [DEL 2005]

L'emboutissage de coupes cylindriques est un exemple de procédé de mise en forme où l'utilisation d'une seule particule est justifiée. La forme finale de la coupe et la distribution des contrainte résiduelles dépendent toutes deux de la texture. Des mesures de diffraction aux bords de la coupe montrent que la texture initiale, induite par le laminage et le recuit qui suit, est significativement altérée par le procédé d'emboutissage [SAV 1994].

Dans cette étude concernant la méthode de réduction du temps de calcul, le procédé d'emboutissage est simulé avec le code EF ABAQUS et la même loi matériau que celle utilisée précédemment [DEL 2005a], cette fois sous la forme d'une routine UMAT.

Le but de cette étude est de déterminer combien de grains doivent être distribués sur le maillage EF pour avoir une représentation correcte de l'anisotropie induite par la texture. Deux types de textures initiales sont considérés : la première correspond à celle d'une tôle d'acier laminée à froid [LI 2003] et la deuxième est une texture aléatoire. La distribution selon le volume des EFs est considérée.

V.4.2.1 Simulation préliminaire : test de traction uniaxiale

La tôle d'acier a été investiguée en premier [SAV 1994]. La texture initiale mesurée par diffraction aux rayons X a été discrétisée en un échantillonnage d'orientations cristallographiques en utilisant l'algorithme de Toth et Van Houtte [TOT 1992]. Par souci de comparaison, une seconde tôle d'acier est investiguée, celle-ci étant supposée isotrope. L'ensemble des orientations cristallographiques représentant le deuxième acier est créé avec un générateur aléatoire. Les fonctions de distributions des orientations (FDOs) recalculées par l'échantillonnage des orientations initiales sont présentées ainsi que les textures de déformation produites Figures V.17 et V.18.

Comme analyse préliminaire, nous simulons un essai de traction uniaxiale pour la tôle d'acier texturée en appliquant la théorie de la plasticité cristalline à un unique VER (Volume Elémentaire Représentatif) représenté par 1000 grains. Le glissement des dislocations intervient selon les systèmes de glissement {110}<111> et {112}<111>. La cission critique résolue (CRSS), τ_c, est supposée identique sur les 24 systèmes de glissement. La loi d'écrouissage est implémentée sous la forme de la loi de Swift (Equation V.12) (au lieu de la loi de Voce dans les cas précédents (Equation IV.24)) :

$$\tau_c = \mathrm{H}_0\left(\Gamma_0 + \Gamma\right)^n \qquad \text{(V.12).}$$

Les valeurs suivantes sont assignées aux paramètres d'écrouissage : H_0= 135 MPa, Γ_0=0.0115 et n=0.26. Γ représente la quantité de glissement de dislocation accumulée à chaque pas de temps, à l'intérieur d'un grain (Equation V.13). Les taux de glissement sont calculés à l'aide d'une expression exponentielle viscoplastique, dans laquelle $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes de Cauchy, $\boldsymbol{M^{\alpha}}$ est le tenseur de Schmid, $\dot{\gamma}_0 = 0.001\, s^{-1}$ et m= 0.01.

$$\Gamma = \int \left(\sum\nolimits_{\alpha} \left|\dot{\gamma}^{\alpha}\right|\right) dt = \int \left(\sum\nolimits_{\alpha} \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{M}^{\alpha}}{\tau_c} \right|^{1/m} \right) dt \qquad \text{(V.13).}$$

Selon les caractéristiques de la loi d'écrouissage, la simulation de traction uniaxiale fournit une valeur du coefficient de Lankford. Rappelons que le coefficient de Lankford est une mesure du rapport de déformation plastique latérale sur la déformation plastique en épaisseur d'une éprouvette en traction uniaxiale. Nous supposons que l'anisotropie de la tôle est plane (c'est-à-dire qu'elle ne varie que dans le plan de laminage) en considérant des directions de traction variées dans le plan de

laminage. Selon les résultats présentés Figure V.14, les simulations sont correctes sur un unique VER (Volume Elémentaire Représentatif) lorsqu'il contient au moins 1000 grains. Notons que dans le cas de la texture aléatoire, pour un nombre de grains fixé, l'erreur par rapport à la solution de référence avec 100000 grains est plus importante que dans le cas de la texture expérimentale qui, elle, est orientée.

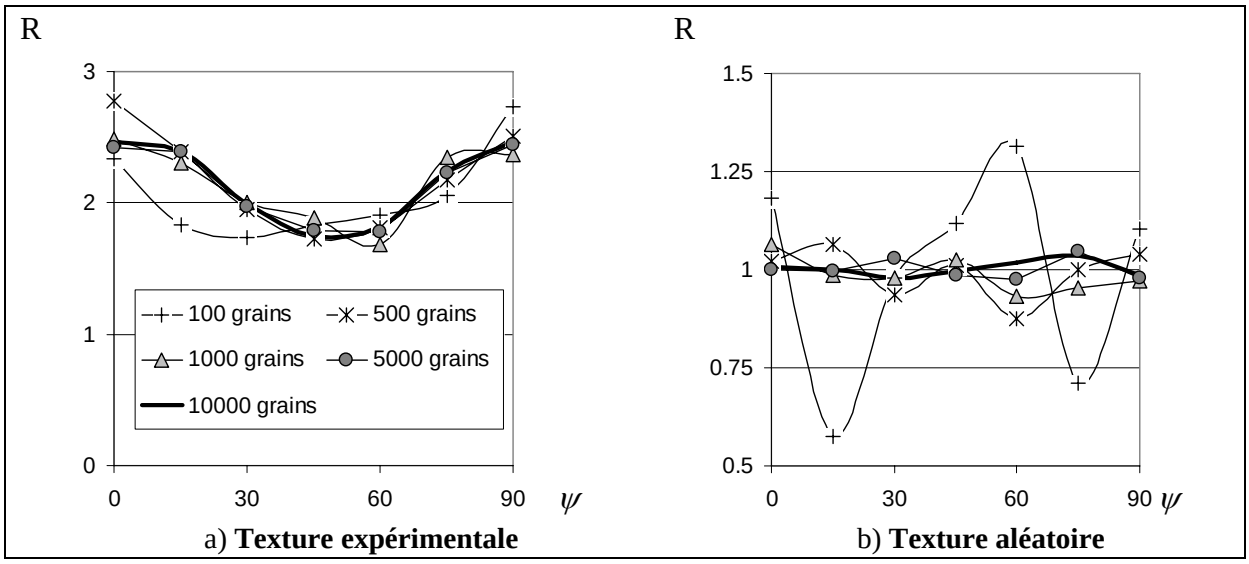


Figure V.14 *Coefficient de Lankford, R, prédit par l'échantillonnage de grains réduit. La légende indique le nombre de grains dans le RVE. Ψ [°] est l'angle de la direction de traction par rapport à RD.*

V.4.2.2 Simulation EF de l'emboutissage

Le maillage EF utilisé dans cette étude est représenté Figure V.15. La géométrie des outils et les dimensions de la tôle sont données dans la publication de Li et al. [LI 2003]. Le flan est de 100 mm de diamètre, et 0.8 mm d'épaisseur. Le diamètre du poinçon est de 50 mm et le rayon du congé est de 5 mm. Le rayon du congé de l'outil est de 10 mm et le jeu de coiffage entre le poinçon et l'outil est de 1.25 mm. La tôle d'acier est représentée par 699 éléments hexaédriques formant une seule couche selon l'épaisseur du disque. Chaque élément comporte 8 points d'intégration et un formalisme spécifique (C3D8I) permet aux éléments d'être aptes à se plier. Nous remarquons là encore une différence avec les cas précédents puisque ce n'est pas le même type d'EF que dans le cas du logiciel EF Forge3®. Le nombre d'éléments utilisé pour représenter la tôle est considéré comme minimal : un maillage moins raffiné ne permettrait pas de représenter de manière satisfaisante la géométrie de la coupe. Le frottement entre la tôle et les outils est négligé. Une pression de serre-flan de 100 MPa est imposée. Le poinçon se déplace vers le bas à une vitesse constante de 1 mm/s. Le déplacement total du poinçon se fait sur une distance de 55 mm (Figure V.15 b et d). Lors de cette étude, nous appellerons VER un point d'intégration du maillage EF, nous ne parlerons donc plus de nombre moyen d'orientations par EF mais plutôt par VER ou par point d'intégration du maillage. En effet, il y a 8 points d'intégration par élément et chacun a son groupe d'orientations ou VER respectif.

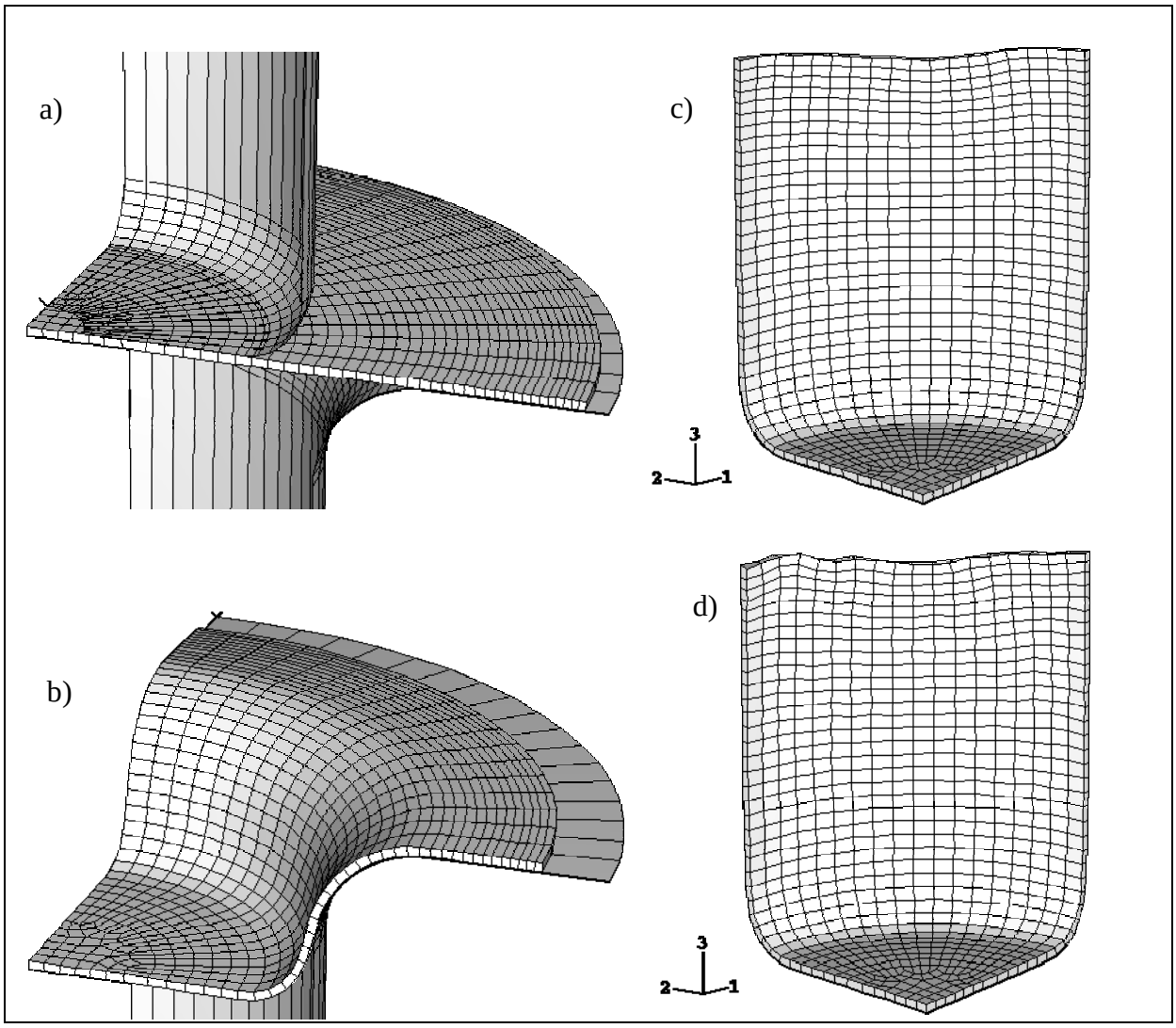


Figure V.15 *Illustration du maillage EF utilisé pour simuler l'emboutissage. a) Condition initiale, b) après un déplacement du poinçon de 20 mm, c) forme finale de l'acier texturé dans le cas où chaque RVE contient ~100 grains, d) forme finale de l'acier texturé dans le cas où chaque RVE contient ~5 grains.*

Les calculs ont été effectués sur un Pentium IV (1.7GHz) ou un Compaq-alpha (1.25 GHz). Le temps de calcul est reporté dans le Tableau V.10. Il atteint un minimum lorsque 5 grains sont considérés à chaque point d'intégration. Surtout dans le cas où très peu de grains sont considérés, un grand nombre de pas de temps est requis. Ceci est dû aux irrégularités locales du champ de déformation. Les conséquences sur les prédictions sont discutées par la suite.

Nombre total de grains distribués dans le maillage	Nombre moyen de grains à l'intérieur de chaque VER	Nombre de pas de temps	Temps de calcul
25000	5	400	3 h
100000	20	280	5 h
200000	40	290	9 h
500000	100	280	20 h

Tableau V.10 *Description des simulations d'emboutissage avec un nombre réduit de grains.*

V.4.2.3 Résultats des simulations d'emboutissage

Un premier objectif des simulations d'emboutissage est la prédiction de la forme finale de la coupe qui permet d'évaluer si la prédiction d'anisotropie mécanique est correcte. Dans le cas de la tôle d'acier texturée, la hauteur de la coupe varie selon la circonférence de la tôle et le modèle est en accord avec la tendance expérimentale (Figure V.16-a). En ce qui concerne la tôle d'acier avec une texture aléatoire, le résultat isotrope est obtenu seulement lorsqu'un plus grand nombre de grains est utilisé (Fig. V.16-b).

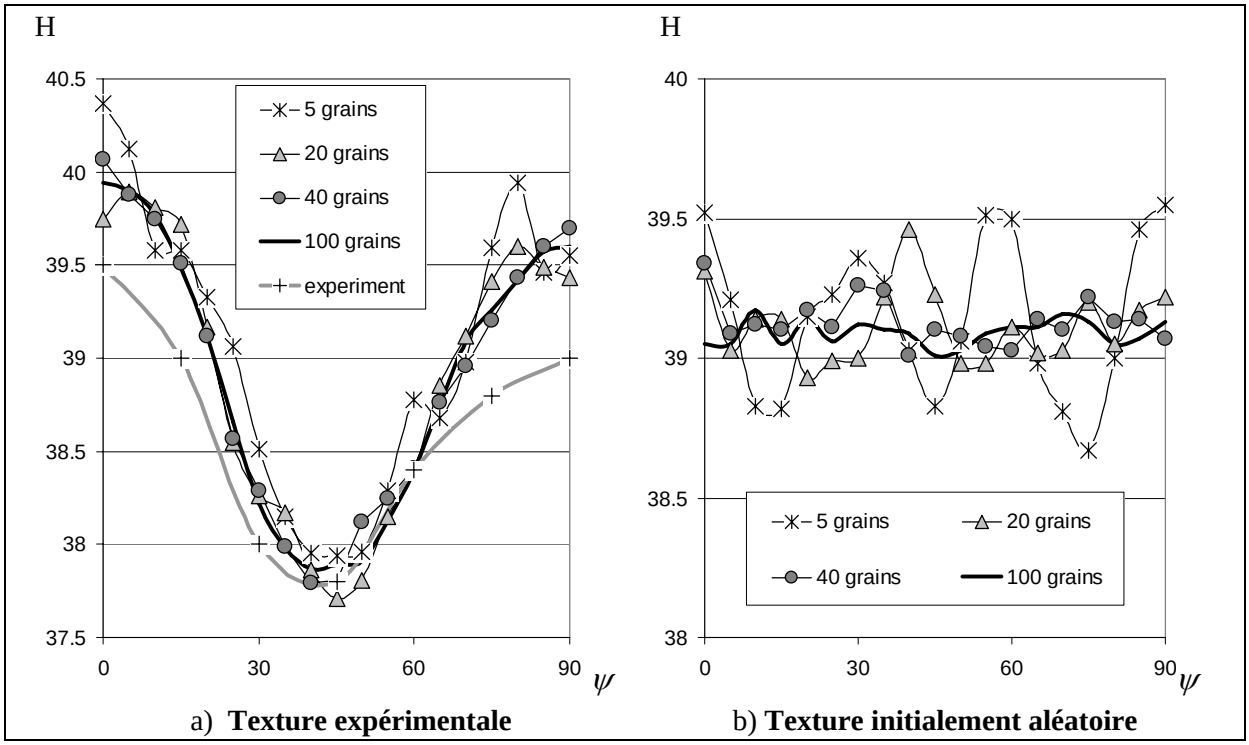


Figure V.16 *Profil de la hauteur de la coupe, H [mm], prédite par les EFS en fonction du nombre de grains dans chaque VER (ou point d'intégration).*

Regardons maintenant la prédiction de texture sur les bords de la coupe. Les textures obtenues sont représentées Figure V.17 et V.18. Chaque texture représente la texture de 5 éléments positionnés près du haut de la coupe. Par convention, x_1 est la direction d'emboutissage, x_2 la direction circonférentielle et x_3 la normale au plan de la tôle. Les FDOs sont bien comparables avec les mesures expérimentales [SAV 1994]. Les prédictions de textures sont valides aussi dans le cas où il y a seulement 5 grains par point d'intégration du maillage.

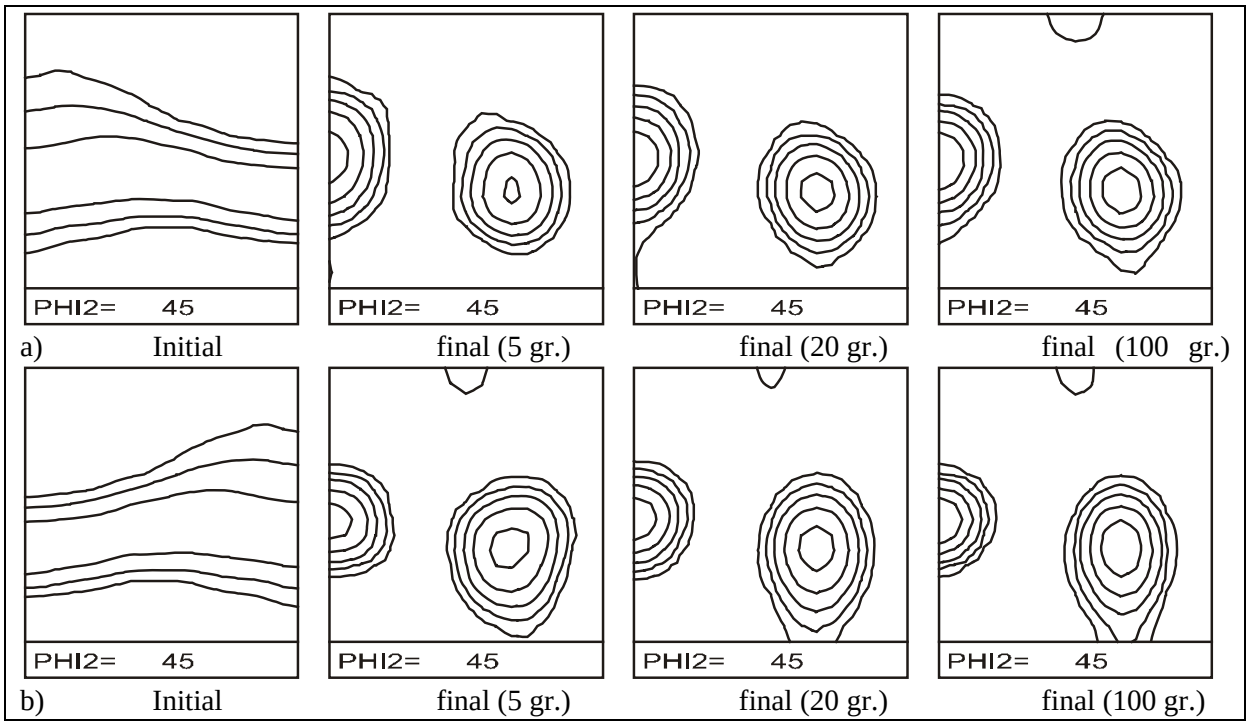


Figure V.17 *Texture de tôle d'acier laminé initial [SAV 1994]. Prédiction pour 5 éléments positionnés proches du haut de la coupe et alignés, respectivement, selon a) RD et b) TD. Le nombre moyen de grains à travers chacun des 40 VER (5 EFs) est indiqué dans la légende. Contours: 1 / 2 / 4 / 8 / 16.*

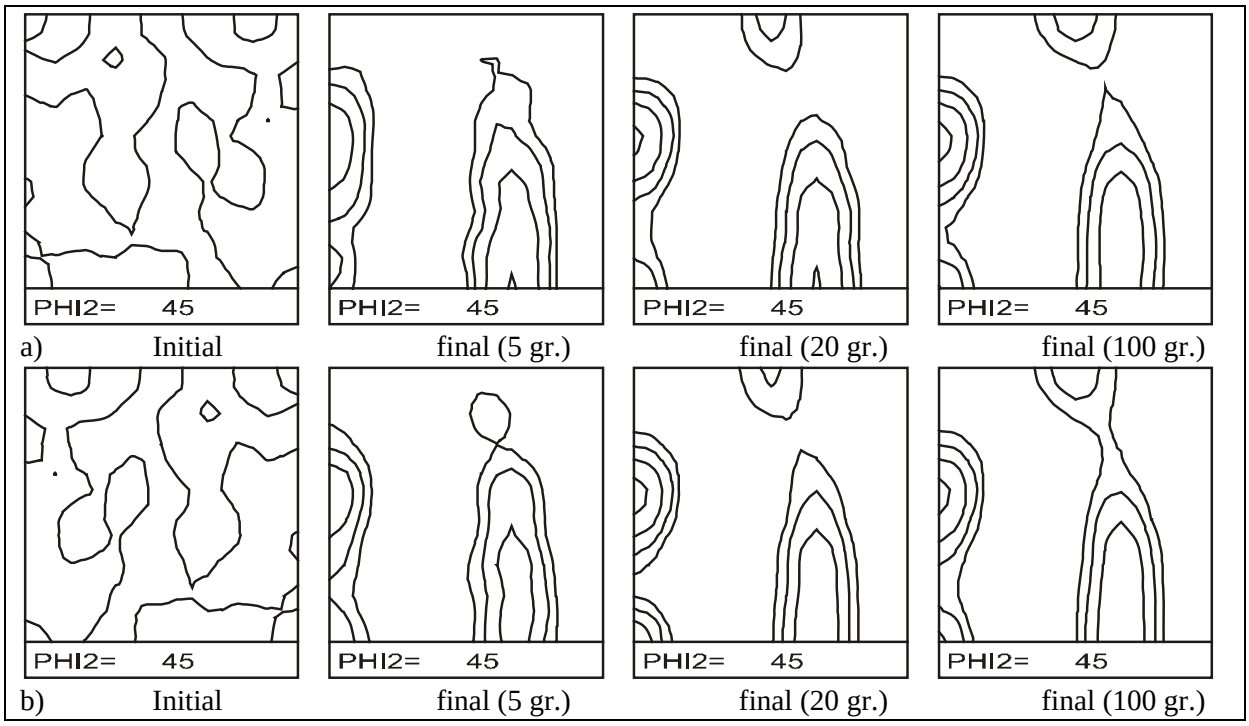


Figure V.18 *Texture de l'acier initialement isotrope. Prédictions pour 5 éléments positionnés proches du haut de la coupe et alignés, respectivement, selon a) RD et b) TD. Le nombre moyen de grains à travers chacun des 40 VER (5 EFs) est indiqué dans la légende. Contours: 1 / 2 / 4 / 8 / 16.*

V.4.2.4 Discussion

Les procédés de déformation uniforme, tels que des essais de traction uniaxiale, peuvent être simulés en appliquant la plasticité cristalline sur un unique VER. Dans la présente analyse, nous avons besoin de 1000 grains pour prédire avec une précision suffisante l'anisotropie des deux textures considérées (Figure V.14).

La modélisation de l'emboutissage de coupes cylindriques nécessite un maillage EF composé d'environ 700 éléments. Représenter chaque point d'intégration par un VER contenant 1000 grains donnerait des temps de calcul excessifs. Cependant, la présente analyse montre qu'une moyenne de 20 grains par point d'intégration conduit à des prédictions similaires à celles où ce nombre de grains considéré est multiplié par 5 (ou plus). La représentation de la texture est incomplète à l'intérieur d'un EF mais la déformation locale est contrainte par les éléments qui l'entourent.

Le couplage plasticité cristalline/ EF permet de rendre compte de l'évolution de la texture durant l'emboutissage. Afin de préciser l'influence de la texture sur les résultats des simulations, nous avons effectué une simulation sans évolution de texture. Les textures initiales et finales sont toutes deux aléatoires et les bords de la coupe sont plus élevés de 0.4 mm par rapport aux résultats obtenus montrés Figure V.16 b. La différence est de l'ordre du profil de la corne quand la texture de la tôle est représentée par une texture de laminage à froid [DEL 2005]. Il est donc nécessaire de tenir compte de l'évolution de la texture cristallographique au cours de la déformation, ce qui jusitifie à posteriori l'utilisation de modèles polycristallins par rapport à des modèles de surface de charge de type Hill ou Barlat.

V.5 Application de la méthode de distribution dans un cas de déformation hétérogène avec plusieurs particules Lagrangiennes

Nous allons dans ce dernier paragraphe répondre aux trois questions suivantes :

-1) comment doit-on distribuer les orientations cristallographiques dans le maillage lorsqu'il y a plusieurs particules ?

-2) est-il nécessaire de considérer N particules dans le maillage EF (plutôt qu'une seule) lorsqu'il n'y a pas de remaillage au cours de la simulation ?

-3) la stratégie de couplage utilisée (couplage faible-couplage fort) influence-t-elle la prédiction d'anisotropie mécanique, lorsqu'il y a N particules ?

V.5.1 Méthodes de distribution des orientations avec plusieurs particules

Considérons que nous voulons distribuer l textures initiales dans le maillage où sont positionnées p particules de volumes associés variables. Pour la notion de volume d'une particule (ou cellule), le lecteur pourra se référer au chapitre III section III.2.3.1. Chaque particule définit une cellule qui est composée d'un certain nombre d'EFs de volumes variables. Nous noterons $nelt(p)$ le nombre d'EFs associés à la particule p.

Nous allons tout d'abord définir deux types de distribution des orientations dans le cas où plusieurs particules sont positionnées dans le maillage EF :

- la méthode de distribution selon le volume,
- la méthode de distribution semi-constante (et non plus constante).

V.5.1.1 Principe général des deux méthodes de distribution des orientations sur les particules

V.5.1.1.1 La méthode de distribution selon le volume

La méthode de distribution selon le volume se déroule de la façon suivante, une fois fixé le nombre de textures initiales à distribuer dans le maillage EF :

- Etape 1 : le nombre de textures attribuées à chaque particule est calculé proportionnellement au volume de la particule en utilisant le même algorithme que celui de la distribution selon le volume présenté en V.2.3. Il suffit de remplacer dans cet algorithme le volume de l'élément fini par le volume de la cellule (ou particule).

- Etape 2 : le nombre d'orientations affectées à chaque EF dans une même cellule de particule *p* est calculé à l'aide de l'algorithme de distribution selon le volume en considérant cette fois comme volume total le volume de la cellule. Le nombre d'orientations total dépend donc de la particule et est calculé à l'étape 1.

Ainsi, à l'aide de cette méthode, les orientations cristallographiques ont la même fraction volumique aux erreurs d'arrondi près apparaissant dans la première et dans la deuxième étape de distribution. L'erreur commise par cette méthode de distribution est plus élevée que celle commise dans le cas où une seule particule est positionnée dans le maillage EF, puisqu'il y a deux niveaux de distribution.

V.5.1.1.2 La méthode de distribution semi-constante

La méthode de distribution semi-constante est mise en place de la manière suivante une fois fixé le nombre moyen d'orientations par EF (déduit du nombre d'EFs et du nombre de textures que l'on choisit de distribuer dans le maillage) :

- Etape 1 : à l'aide du nombre moyen d'orientations par EF fixé *n* et du nombre d'EFs dans chaque particule $nelt(p)$, nous calculons le nombre de textures à distribuer dans chaque particule noté *l(p)* de la même façon que dans la méthode de distribution constante.

- Etape 2 : les textures affectées à chaque particule sont ensuite attribuées par la méthode de distribution selon le volume aux EFs de la cellule de particule.

Nous avons nommé cette méthode la méthode de distribution semi-constante car elle ne tient pas compte du volume des cellules pour calculer le nombre de textures à distribuer dans les cellules, mais elle tient compte du volume des EFs dans la cellule pour distribuer les orientations dans les EFs.

V.5.1.2 Comparaison des deux méthodes de distribution des orientations sur les particules

Pour tester ces deux méthodes de distribution, nous nous sommes placés dans le cas d'étude suivant :

- nous simulons à nouveau la compression uniaxiale du cylindre avec frottement,
- nous plaçons 27 particules dans le maillage EF, en divisant le maillage selon 3 hauteurs égales, avec sur chacune des hauteurs 9 particules (Figure V.19).
- nous distribuons 45 textures sur les particules soit en moyenne 49,76 orientations par EF,
- nous utilisons les deux méthodes de distribution des orientations qui viennent d'être présentées.

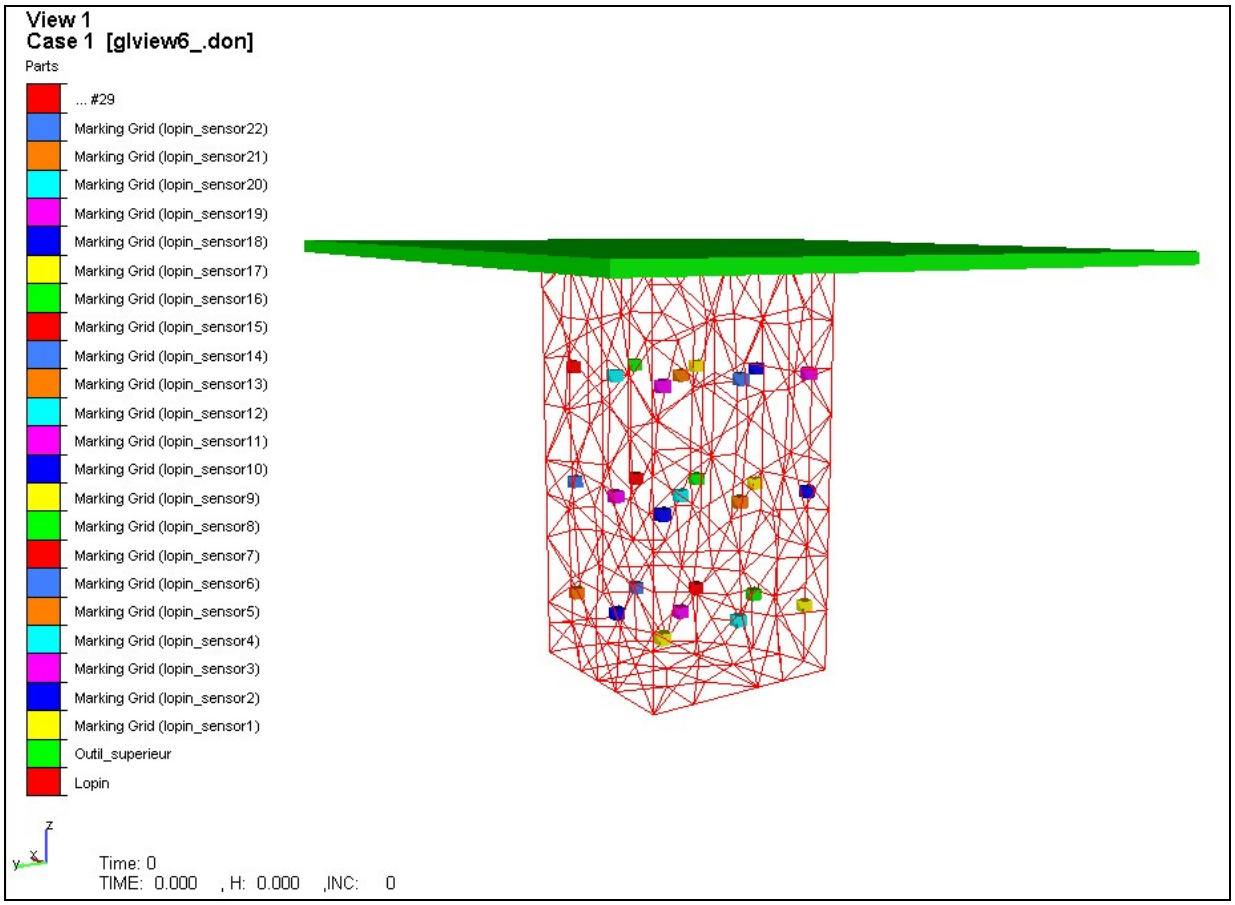


Figure V.19 *Position des 27 particules dans le maillage EF initial.*

Les rapports d'anisotropie sont étudiés à l'aide des rapports L1/L2 et L1/L3 (déjà définis antérieurement) sur le maillage entier et sur la zone la plus déformée. Ils sont présentés Tableau V.11. Les rapports varient légèrement selon la méthode de distribution utilisée. Les erreurs relatives par rapport à la simulation avec une texture par EF (cf. chapitre IV section IV.2.2.1) sont reportées Tableau V.12. Elles sont plus élevées pour la méthode de distribution semi-constante. Elles atteignent des valeurs supérieures à 2% dans le cas de la méthode de distribution semi-constante alors qu'elles atteignent des valeurs < 1.6% dans le cas de la méthode de distribution selon le volume.

	L1/L2 Maillage entier	L1/L3 Maillage entier	L1/L2 Zone déformée	L1/L3 Zone déformée
Référence 1 texture / EF	1.251	2.662	1.427	3.926
Volume	1.262	2.672	1.450	3.985
Semi-Constante	1.265	2.675	1.642	4.018

Tableau V.11 *Rapports d'anisotropie dans le cas où 27 particules sont placées dans le maillage et 45 textures sont distribuées dans le maillage soit en moyenne 50 orientations/EF.*

Erreur relative (en %)	L1/L2 Maillage entier	L1/L3 Maillage entier	L1/L2 Zone déformée	L1/L3 Zone déformée
Volume	0.865	0.393	1.568	1.497
Semi-Constante	1.120	0.483	2.430	2.340

Tableau V.12 *Erreur relative (en %) des rapports d'anisotropie dans le cas où 27 particules sont placées dans le maillage et 45 textures sont distribuées dans le maillage par rapport au cas où une seule texture est considérée par EF.*

L'écart-type relatif du poids des orientations de la texture initiale (ETRini) est reporté Tableau V.13. Il est légèrement plus élevé pour la méthode de distribution semi-constante, le volume des particules n'étant pas pris en compte lors de la distribution des textures dans les particules.

	Maillage initial	Maillage final
Volume	1.16 E-03	1.11 E-02
Semi-Constante	2.30 E-03	1.38 E-02

Tableau V.13 *Ecart type relatif du poids des orientations de la texture initiale (ETRini) en fonction de la méthode de distribution – 27 particules et 45 textures.*

Comparons les résultats obtenus pour la distribution selon le volume avec 27 particules au cas avec une seule particule qui lui correspond (*n=50)*. Rappelons tout d'abord les résultats sur les erreurs relatives des rapports d'anisotropie par rapport à la simulation de référence (une texture / EF) obtenues pour la simulation 27 particules (cf. Tableau V.15) :

- 0.865% pour L1/L2 et 0.393% pour L1/L3 dans le maillage entier,
- 1.568% pour L1/L2 et 1.497% pour L1/L3 dans la zone déformée,

et pour celle avec 1 particule (cf. Tableaux V.8 et V.10 - *n=50*) :

- 0.438% pour L1/L2 et 0.263% pour L1/L3 dans le maillage entier,
- 1.205% pour L1/L2 et 0.542% pour L1/L3 dans la zone déformée.

Les erreurs relatives sur les rapports d'anisotropie sont légèrement plus importantes dans le cas où 27 particules sont positionnées dans le maillage EF.
L'écart-type relatif du poids des orientations est plus important dans le cas avec 27 particules, il traduit les erreurs d'arrondi liées à la méthode de distribution. Dans le cas de la distribution selon le volume avec plusieurs particules, deux erreurs sont cumulées :

- la première est liée à l'erreur d'arrondi lors de la distribution des textures sur les cellules,
- la deuxième est liée à l'erreur d'arrondi lors de la distribution des orientations sur les EFs.

Dans le cas de la distribution selon le volume avec une seule particule, seule la deuxième erreur était commise.

Dans le cas où la distribution semi-constante est utilisée, le fait que l'anisotropie est moins bien prédite montre qu'il est nécessaire de distribuer correctement les orientations de la texture de telle sorte que leur poids sur l'ensemble du maillage soit identique. En effet, avec la méthode de distribution des orientations semi-constante, le poids des orientations d'une même cellule est identique. Le calcul mécanique est faussé si les EFs de part et d'autre d'une même cellule n'ont pas le même poids, car cela revient à privilégier l'influence d'une cellule par rapport à une autre. Cette méthode de distribution des orientations ne permet donc pas une bonne représentation du comportement mécanique du matériau dans la mesure où les orientations d'une cellule interagissent avec celles de la cellule voisine.

Considérer plusieurs particules dans le maillage EF génère dans le cas étudié des erreurs d'arrondi plus importantes lors de la distribution selon le volume. Elle n'apporte donc pas une meilleure prédiction de l'anisotropie.

V.5.2 Comparaison d'un cas avec une seule particule et plusieurs particules pour le couplage fort et le couplage faible

Nous allons, pour un nombre fixé de textures initiales distribuées dans le maillage, comparer les résultats obtenus en terme de prédiction d'anisotropie lorsque :

- les textures sont distribuées sur une ou plusieurs particules (à l'aide dans les deux cas de la méthode de distribution selon le volume),
- la stratégie de couplage modèle EF/ modèle polycristallin est soit le couplage fort soit le couplage faible.

Ces comparaisons sont menées dans le but de répondre aux deux questions qui suivent :

- La stratégie de couplage utilisée influence-t-elle la prédiction d'anisotropie mécanique ?
- Considérer un nombre p (avec $p>1$) de particules dans le maillage permet-il de mieux rendre compte de l'anisotropie mécanique dans le cas des simulations sans remaillage ?

V.5.2.1 Présentation des simulations

Nous simulons à nouveau la compression uniaxiale avec frottement. Nous distribuons 66 textures dans le maillage EF à l'aide de la distribution selon le volume. Les paramètres de la simulation sont :

- le nombre de particules dans le maillage EF : nous considérons 1, 27 et 48 particules dans le maillage. Les 27 particules sont positionnées en 3 couches selon la hauteur de l'éprouvette, chaque couche étant composée de 9 particules. Les 48 particules sont positionnées en 3 couches selon la hauteur de l'éprouvette avec sur chaque couche 16 particules.
- la stratégie de couplage EF/modèle polycristallin : nous étudions le couplage faible et le couplage fort.

V.5.2.2 Résultats

V.5.2.2.1 Prédiction d'anisotropie mécanique

Les résultats en terme de prédiction d'anisotropie sont étudiés à l'aide des rapports L1/L2 et L1/L3, et sont répertoriés Tableau V.14. Ils sont calculés sur le maillage entier et sur la zone la plus déformée. Les erreurs relatives sur les rapports d'anisotropie obtenues par rapport à la simulation avec une texture par EF et le couplage fort (cf. chapitre IV section IV.2.2.2.2) sont reportées Tableau V.15.

	L1/L2 Maillage entier	L1/L3 Maillage entier	L1/L2 Zone déformée	L1/L3 Zone déformée
1 particule / couplage fort	1.265	2.675	1.451	3.984
27 particules / couplage fort	1.259	2.670	1.443	3.959
48 particules / couplage fort	1.258	2.668	1.439	3.949
1 particule / couplage faible	1.268	2.677	1.459	4.017
48 particules / couplage faible	1.265	2.675	1.454	3.998

Tableau V.14 *Rapports d'anisotropie dans le cas où 66 textures sont distribuées dans le maillage pour un couplage fort et un couplage faible.*

Stratégie de couplage utilisée

Quelque soit le nombre de particules positionnées dans le maillage, les erreurs relatives des rapports d'anisotropie sont plus élevées pour le couplage faible que pour le couplage fort, mais restent limitées.

Comparons les résultats obtenus pour un nombre de particules fixé entre le couplage fort et le couplage faible.La différence maximale est de 1.24% obtenue dans la zone déformée pour 48 particules. Le fait de considérer des textures partielles sur les EFs amplifie la différence obtenue entre le couplage faible et le couplage fort puisqu'elle cumule à l'erreur de couplage l'erreur liée à la distribution des orientations.

Erreur relative (en %)	L1/L2 Maillage entier	L1/L3 Maillage entier	L1/L2 Zone déformée	L1/L3 Zone déformée
1 particule / couplage fort	1.121	0.496	1.703	1.466
27 particules / couplage fort	0.663	0.306	1.106	0.838
48 particules / couplage fort	0.548	0.241	0.830	0.582
1 particule / couplage faible	1.347	0.574	2.215	2.234
48 particules / couplage faible	1.106	0.474	1.897	1.819

Tableau V.15 *Erreurs relatives (en %) des rapports d'anisotropie selon la stratégie de couplage utilisée et le nombre de particules positionnées dans le maillage EF.*

Nombre de particules dans le maillage EF

Dans cette étude, où 66 textures sont distribuées dans le maillage EF, considérer 48 particules ou 27 particules au lieu de une seule particule permet de réduire l'erreur relative concernant la prédiction d'anisotropie quelque soit la stratégie de couplage utilisée.

Cependant, ce résultat n'est pas lié au fait que nous considérons plusieurs particules dans le maillage mais il est lié à l'écart-type relatif du poids des orientations de la texture dans le maillage initial et au cours de la déformation. Les résultats concernant l'écart-type relatif sont répertoriés Tableau V.16. Dans le maillage EF initial, nous avons un écart-type relatif plus élevé dans le cas où nous considérons plusieurs particules dans le maillage EF comparé au cas où il y a une seule particule dans le maillage EF, ceci étant lié au cumul des erreurs lors de la distribution sur les particules. Néanmoins, la précision en terme d'anisotropie est moins bonne dans le cas où il y a seulement une seule particule pour la déformation finale. Ceci est dû à l'évolution de l'écart-type relatif de la fraction volumique des orientations au cours de la déformation (cf. Tableau V.16 – Maillage final). Pour l'ensemble des simulations précédentes, l'*ETRini* évoluait aussi au cours de la déformation, du fait des variations de volume des EFs, néanmoins les tendances initiales (*ETRini* plus petit lorsque le nombre d'orientations considérées dans le maillage augmentait ou lorsqu'il y avait une seule particule) étaient conservées.

	1 particule couplage fort	27 particules couplage fort	48 particules couplage fort	1 particule couplage faible	48 particules couplage faible
Maillage initial	4.26 E-04	7.62 E-04	6.43 E-04	4.26 E-04	6.43 E-04
Maillage final	2.96 E-02	1.17 E-02	9.17 E-03	9.96 E-03	9.22 E-03

Tableau V.16 *Ecart type relatif du poids des orientations de la texture initiale dans le maillage EF en fonction du nombre de particules et du couplage.*

V.5.2.2.2 Temps de calcul des simulations

Le temps de calcul des simulations est reporté Tableau V.17. Nous voyons là encore que considérer la stratégie de couplage faible permet de réduire considérablement le temps de calcul des simulations. Le facteur de réduction moyen obtenue est de 9 entre la stratégie de couplage faible et de couplage fort. Si maintenant, nous examinons le facteur de réduction entre une texture par EF (soit 1085 textures dans le maillage initial) et 66 textures dans le maillage initial, nous avons un facteur de réduction moyen de 20 dans le cas de la stratégie de couplage faible. Le temps de calcul des simulations utilisant la stratégie de couplage faible couplée à la méthode de distribution des orientations permet donc de réduire considérablement le temps de calcul des simulations (25min pour le couplage faible et 66 textures au lieu de 55h40min pour le couplage fort et 1085 textures) .

	1 particule couplage fort	1 particule couplage faible	27 particules couplage fort	48 particules couplage fort	48 particules couplage faible
Temps CPU	3h17min38s	25min33s	4h7min32s	4h24min34s	25min22s

Tableau V.17 *Temps CPU des simulations avec 66 textures distribuées dans le maillage avec un Pentium IV (1.8 GHz).*

V.5.2.3 Discussion

Nous avons vu à l'aide de cette étude que distribuer plusieurs particules induit que le poids des orientations de la texture initiale est plus variable. Le poids des orientations de la texture initiale traduit comme nous l'avons vu l'erreur commise par la méthode de distribution.

Néanmoins, la précision sur la prédiction du rapport d'anisotropie dépend non seulement du poids des orientations dans le maillage initial mais aussi de leur évolution au cours de la déformation. Le poids des orientations évolue au cours de la déformation car le volume des EFs peut varier au cours de la déformation, l'incompressibilité étant respectée seulement au sens de la formulation faible, c'est-à-dire sur un ensemble d'éléments.

Distribuer les textures sur plusieurs particules ne permet donc pas d'avoir de façon systématique une meilleure précision sur la prédiction de texture comme en témoignent les calculs faits sur 27 particules en section V.5.1.2 et V.5.2.2, où ne différent que le nombre de textures distribuées (45 et 66), et où dans le premier cas les résultats sont meilleures avec une particule, et dans le deuxième cas avec plusieurs particules. Cependant, nous pouvons préférer cette méthode dans la mesure où l'information concernant la texture initiale et son évolution est regroupée sur des zones compactes et non plus aléatoirement dans le maillage, ce qui permet une analyse des résultats plus pertinente.

La stratégie de couplage faible donne des résultats légèrement moins précis que celle du couplage fort, comme dans le cas discuté auparavant, avec une texture par EF. Dans le cas où les textures sont distribuées dans le maillage, cette stratégie de couplage cumule deux erreurs : la première

liée au couplage à proprement parler et la seconde liée à la stratégie de distribution des textures dans le maillage.

Néanmoins, suivant la précision souhaitée concernant l'anisotropie, cette stratégie de couplage sera préférée dans la mesure où elle permet d'obtenir des temps de calcul beaucoup plus raisonnables que dans le cas du couplage fort, puisqu'elle cumule le gain de temps de calcul lié à la stratégie du couplage (d'autant plus élevé que le nombre d'itérations par incréments de temps dans la stratégie de couplage fort est élevé), et le gain lié à la méthode de distribution des orientations.

Conclusion

La méthode de distribution des textures initiales dans le maillage entraîne l'utilisation de textures partielles pour le calcul du comportement mécanique au niveau des EFs. Elle induit donc des fluctuations locales au niveau du comportement mécanique même pour des EFs soumis à un chargement homogène. Cependant, ces fluctuations induisent peu d'imprécision sur la prédiction d'anisotropie et d'évolution de texture dans le cas où la disparité du poids des orientations de la texture initiale est minimisée (cf. Figure V.8).

Pour minimiser la disparité du poids des orientations de la texture initiale et minimiser le nombre de textures initiales, il est préférable comme nous l'avons vu de considérer la méthode de distribution selon le volume. Si le nombre d'orientations par EF pouvait être un réel, le poids serait constant. Cependant, le nombre d'orientations par EF devant être un entier, des erreurs d'arrondi apparaissent et induisent une disparité du poids des orientations de la texture initiale. Afin de minimiser cette disparité avant de lancer la simulation, il est possible de calculer l'écart-type relatif du poids des orientations de la texture initiale et vérifier qu'il est suffisamment petit (de l'ordre de 10^{-3} à 10^{-4} par exemple) pour un nombre de textures donné. S'il n'est pas suffisamment petit, il faut considérer un nombre plus élevé de textures dans le maillage, ou bien accepter l'erreur résultante.
Pour minimiser la disparité du poids des orientations de la texture initiale dans le cas des simulations ne nécessitant pas le remaillage et diminuer le nombre de textures à considérer dans le maillage EF, mieux vaut utiliser la distribution des orientations sur une seule particule. En effet, pour un nombre de textures donné, distribuer les orientations sur plusieurs particules augmente la disparité du poids des orientations. Lorsque les orientations sont distribuées sur plusieurs particules, nous cumulons en effet l'erreur liée à la méthode de distribution des textures dans les cellules à celle liée à la méthode de distribution sur les EFs.

Néanmoins, il est bien entendu nécessaire de considérer un nombre suffisant de textures dans le maillage EF.

La méthode de distribution des orientations permet de réduire notablement le temps de calcul des simulations, celui-ci étant fortement lié au nombre total d'orientations dans le maillage. Elle permet en effet de diminuer le nombre d'orientations totales considérées dans le maillage comparé à l'utilisation de la méthode classique qui consiste à considérer une texture par EF. Nous précisons que nous faisons ici un abus de langage lié au code EF Forge3® que nous utilisons. En effet, nous devrions plutôt parler de points d'intégration dans le maillage EF au lieu de nombre d'EFs. Dans le cas du logiciel EF Forge3®, compte tenu du type d'Element Fini considéré, il y a un seul calcul de loi de comportement par EF alors que pour d'autres codes avec d'autres types d'EF, il peut y avoir plusieurs points de calcul par EF, ceux-ci correspondent aux points d'intégration.

L'utilisation de la méthode de distribution et du couplage faible permet de réduire drastiquement le temps de calcul des simulations en augmentant légèrement l'imprécision sur la prédiction de texture et d'anisotropie comparée à la stratégie de couplage fort. Il existe une

imprécision intrinsèque à la stratégie de couplage faible, étant donné que les données microstructurales sont réévaluées une seule fois par incrément de temps.

Nous avons mis en place une méthode de réduction du temps de calcul des simulations de procédés de mise en forme utilisant une rhéologie décrite par un modèle polycristallin. Cette méthode permet d'obtenir des prédictions d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture correctes dans la mesure où la disparité du poids des orientations de la texture initiale est minimisée.

Cependant un des paramètres que nous ne contrôlons pas et qui peut induire des disparités plus importantes au cours de la déformation est l'évolution de ce poids, étant donné que le volume de chaque EF ne reste pas constant en formulation faible. La fluctuation des volumes au cours de la déformation peut venir modifier les prédictions attendues comme nous avons vu dans le cas avec une particule et 66 textures en section V.5.2.2 qui aurait dû mener à une prédiction meilleure que le cas avec 27 particules et 66 textures compte tenu de la meilleure représentation de la texture sur le maillage initial. Nous pouvons imaginer une solution à ce problème qui serait de redistribuer périodiquement les textures dans les EFs au cours de la déformation. Nous exposerons une solution à ce problème dans le prochain chapitre concernant la mise en place d'une stratégie de transport des données microstructurales lors des opérations de remaillage automatique. Nous verrons que dans ce cas il est nécessaire de redistribuer les orientations selon le volume des EFs après un remaillage et de travailler avec plusieurs particules.

Références bibliographiques

[ALI 2000] C. Aliaga, Simulation numérique par éléments finis en 3D du comportement thermomécanique au cours du traitement thermique des aciers : application à la trempe de pièces forgées ou coulées, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 2000.

[BEAU 1996] A.J. Beaudoin, J.D. Bryant, P.R. Dawson, D.P. Mika, Incorporating crystallographic texture in finite element simulations of sheet forming, Proceedings of.NUMISHEET'96', eds. J.K. Lee et al., Ohio State University, USA, pp. 17-24, 1996.

[BER 2004] M. Béringhier, L. Delannay, Y.Chastel and R.E. Logé, Finite element modeling of a compression test with polycrystalline plasticity applied to reduced grain samplings, Proceedings of the 7th ESAFORM Conference, eds. S. Stören, Trondheim, Norway, pp. 167-174, 2004.

[BOY 1999] E. Boyère, Contribution à la simulation numérique tridimensionnelle du forgeage à chaud : étude du contact et calcul multi-grille, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 1999.

[DEL 2005a] Delannay L., Béringhier M., Chastel Y., Logé R.E, Simulation of Cup-Drawing Based on Crystal Plasticity Applied to Reduced Grain Samplings, Materials Science Forum, 495-497, 1639-1644, 2005.

[DEL 2005b] Delannay L, Logé RE, Signorelli JW and Chastel Y, Evaluation of a multisite model for the prediction of rolling textures in hcp metals, International Journal of Forming Processes, 8, 2-3, pp. 159-178, 2005.

[HEL 1994] K. Helming, R.A. Schwarzer, B. Rauschenbach, S. Geier, B. Leiss, H.R. Wenk, K. Ullemeyer and J. Heinitz, Textures Estimates by Means of Components, Z. Metallkde. 85, No. 8, pp. 545-553, 1994.

[HEL 1996] K. Helming, Texturapproximation durch Modellkomponenten, Habiliatation Thesis, Technical University Clausthal, Germany, Cuvillier Verlag Göttingen, Germany, 1996.

[HOS 1993] W.F. Hosford, The Mechanics of Crystals and Textured Polycrystals, Eds. Oxford Science Publications, 1993.

[LI 2003] S. Li, E. Hoferlin, A. Van Bael, P. Van Houtte and C. Teodosiu, Finite element modeling of plastic anisotropy induced by texture and strain-path change, Int. J. Plast. 19, pp. 647-674, 2003.

[LOG 1999] R.E. Logé, Influence des conditions thermomécaniques et de la microstructure sur les évolutions de texture cristallographiques du Zircaloy-4 en mise en forme à chaud, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 1999.

[LOG 2004] R.E. Logé, M. Béringhier, Y. Chastel and L. Delannay, Decreasing computation time in finite element simulations coupled with polycrystalline plasticity, Proceedings of NUMIFORM 2004, eds. S. Gosh and al., Columbus, Ohio, USA, pp. 1754-1759 , 2004.

[LUC 1981] K. Lücke, J. Pospiech, K.H. Virnich and J. Jura, On the problem of the reproduction of the true orientation distribution from pole figures, Acta Metall. 29, pp. 167-185, 1981.

[LUC 1986] K. Lücke, J. Pospiech, J. Jura and J. Hirsch, On the presentation of Orientation Distribution Functions by Model Functions, Z. Metallkde. 77, No. 5, pp. 312-321, 1986.

[RAA 2005] D. Raabe, Y. Wang et F. Roters, Crystal plasticity simulation study on the influence of texture on earing in steel, Computationnal Materials Science 34, pp. 221-234, 2005.

[SAV 1994] J. Savoie and J.J. Jonas, Simulation of the deformation textures induced by deep drawing in extra low carbon steel sheets, Acta metall. mater. 42, pp. 4101-4116, 1994.

[TOT 1992] L. S. Toth and P. Van Houtte, Discretization techniques for orientation distributions functions, Textures and Microstructures 19, pp. 229-244, 1992.

Chapitre VI

Les particules Lagrangiennes et le transport des variables de modèles polycristallins lors du remaillage

Sommaire

VI.1 Remaillage et transport des variables dans Forge3® ……... 113
VI.1.1 Le transport P1 ……... 113
VI.1.2 Le transport P0 ……... 114
VI.2 Le transport des variables de modèles polycristallins lors du remaillage ……... 115
VI.2.1 Position du problème ……..…… 115
VI.2.2 Les différentes stratégies de transport des variables de modèles polycristallins 115
VI.2.2.1 Première stratégie : calcul polycristallin uniquement sur les particules 116
VI.2.2.1.1 Principe général …… 116
VI.2.2.1.2 Présentation des simulations …… 117
VI.2.2.1.3 Résultats ……... 118
VI.2.2.1.4 Discussion concernant la première stratégie …… 118
VI.2.2.2 Deuxième stratégie : calcul polycristallin sur les EFs …….. 119
VI.2.2.2.1 Principe général des deux méthodes …… 119
VI.2.2.2.2 Intérêt des deux méthodes …… 122
VI.3 Comparaison des méthodes 2A et 2B ……..……. 122
IV.3.1 Présentation des simulations …….. 123
VI.3.2 Résultats en terme de prédiction d'anisotropie et d'évolution de texture …….. 123
VI.3.2.1 Influence du nombre de particules dans le maillage EF ……... 124
VI.3.2.1.1 Une seule particule positionnée dans le maillage EF ……... 124
VI.3.2.1.2 Différents nombres de particules dans le maillage EF ……. 130
VI.3.2.2 Influence du nombre de remaillages ……. 135
VI.3.3 Temps de calcul des simulations ……... 140
VI.3.4 Discussion et choix de la méthode de transport des variables de modèles polycristallins lors du remaillage …….. 140
VI.4 Compléments concernant l'étude de la méthode 2B …… 141
VI.4.1 Sensibilité à la taille de maille ……... 141
VI.4.2 Sensibilité au couplage rhéologique utilisé ……... 143
Conclusion ……. 146
Références bibliographiques …… 146

Dans cette partie, nous allons présenter la méthode de transport des variables microstructurales polycristallines lors du remaillage que nous avons mise en place dans le logiciel EF Forge3®. Cette méthode tire parti du formalisme des particules Lagrangiennes.

Dans un premier temps, nous présentons la méthode de transport des variables actuellement utilisée dans Forge3®.

Dans un second temps, nous observons que ce transport ne peut pas être applicable dans le cadre du transport des variables microstructurales en général, et polycristallines en particulier. Nous présentons les trois méthodes que nous avons envisagées pour le transport des variables polycristallines lors du remaillage. Toutes ces méthodes de transport utilisent le formalisme des particules Lagrangiennes. Nous montrons rapidement que la première méthode envisagée ne permet pas de prédire correctement l'anisotropie mécanique.

Pour les deux autres méthodes de transport, nous étudions à l'aide de différents cas de simulations l'influence des paramètres suivants :

- nombre de particules
- nombre de remaillages

sur la prédiction d'anisotropie mécanique et l'évolution de texture. Cette étude nous permet de privilégier une de ces deux méthodes.

Pour la méthode de transport choisie, nous discutons enfin de l'influence de deux autres paramètres : la taille de maille et la stratégie de couplage utilisée.

VI.1 Remaillage et transport des variables dans Forge3®

Au cours de certains procédés de mise en forme tels que le forgeage, le matériau subit de grandes déformations plastiques. Pour une formulation Lagrangienne, cas du logiciel Forge3®, le maillage suit la matière et se déforme tout au long du chemin de déformation de la même façon que la matière. Le maillage initial a donc toutes les chances de dégénérer, et la suite du calcul nécessite donc des opérations de remaillage. Dans cette perspective, un générateur automatique de maillage a été développé dans le code EF Forge3® [COU 1991].

Lors du remaillage, il est nécessaire de transporter les variables d'histoire depuis l'ancien vers le nouveau maillage. Différentes méthodes de transport ont été développées dans le code EF Forge3® selon la nature des variables à transporter. En effet, pour le type d'élément fini de Forge3®, il existe deux types de variables :

- les variables nodales P1,
- les variables élémentaires P0.

Les variables nodales P1 sont calculées et stockées aux nœuds du maillage. Il s'agit par exemple de la vitesse, la pression et la température. Les variables élémentaires P0 sont calculées et stockées aux éléments du maillage, ce sont les autres variables d'état : la vitesse de déformation et la contrainte par exemple.

Deux types de transport ont donc été mis en place dans Forge3® : le transport P0 pour les variables élémentaires et le transport P1 pour les variables nodales. La présentation de ces deux types de transport est inspirée de [BOUS 2005].

VI.1.1 Le transport P1

Le transport des variables nodales P1 s'effectue en deux étapes :

- étape 1 : chaque nœud k du nouveau maillage $T_{h'}$ est projeté sur l'ancien maillage T_h. Cette étape consiste à chercher l'élément *e* de l'ancien maillage qui contient le nœud k du nouveau maillage (Figure VI.1).
- étape 2 : interpolation des valeurs nodales des sommets de l'élément d'appartenance trouvé pour obtenir la valeur au nœud k du nouveau maillage (Figure VI.1).

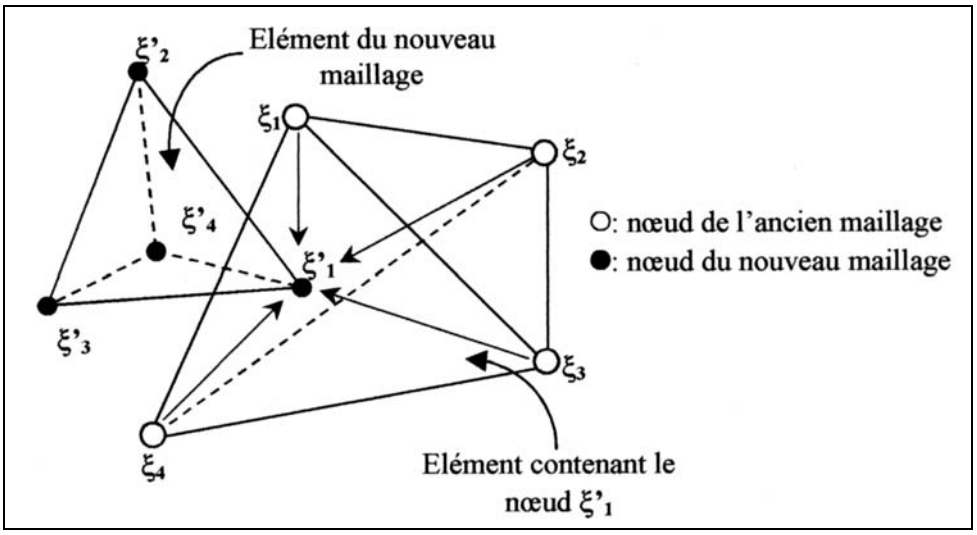


Figure VI.1 *Illustration du transport P1 pour le nœud* ξ_1' *du nouveau maillage.*

L'interpolation des valeurs nodales depuis les sommets de l'ancien maillage est effectuée en utilisant des fonctions de pondération calculées sur le nouveau maillage. Soit V la variable nodale P1 à transporter :

$$\forall\ k \in T_{h'},\quad V_k' = \sum_{i \in e} V_i N(\xi_i) \qquad \text{(VI.1)}$$

où *e* est l'élément courant de l'ancien maillage auquel appartient le nœud *k* du nouveau maillage , V_k' est la variable à calculer sur le nœud k du nouveau maillage $T_{h'}$ et $(V_i)_{i=1,4}$ est la variable calculée aux nœuds i de l'élément de l'ancien maillage. Les fonctions de pondération $(N(\xi_i))_{i=1,4}$ sont définies par :

$$N(\xi_2) = \frac{\det(\overrightarrow{\xi_1\xi_1'}, \overrightarrow{\xi_1\xi_3}, \overrightarrow{\xi_1\xi_4})}{DET},\quad N(\xi_3) = \frac{\det(\overrightarrow{\xi_1\xi_2}, \overrightarrow{\xi_1\xi_1'}, \overrightarrow{\xi_1\xi_4})}{DET}$$

$$N(\xi_4) = \frac{\det(\overrightarrow{\xi_1\xi_2}, \overrightarrow{\xi_1\xi_3}, \overrightarrow{\xi_1\xi_1'})}{DET},\quad N(\xi_1) = 1 - N(\xi_2) - N(\xi_3) - N(\xi_4) \qquad \text{(VI.2)}$$

avec $DET = \det(\overrightarrow{\xi_1\xi_2}, \overrightarrow{\xi_1\xi_3}, \overrightarrow{\xi_1\xi_4})$ et $\sum_{i=1,4} N(\xi_i) = 1$

où les ξ_i sont les nœuds de l'élément *e* et ξ_1' le nœud *k*.

V.1.2 Le transport P0

L'idée du transport P0 utilisée dans Forge3® est de se ramener au transport P1. Une première opération consiste à interpoler aux nœuds de l'ancien maillage les variables stockées aux éléments de celui-ci, afin de transformer les variables P0 en variables P1. Soit $W(x)(x = x_1, x_2, x_3)$ la variable P0 à transporter :

$$W(x) = \sum_{e=1}^{Nbelt} W_e 1^e(x) \qquad \text{(VI.3)}$$

où $1^e(x)$ est la fonction caractéristique de l'élément *e*, qui vaut 1 si *x* appartient à l'élément *e* et 0 sinon.

On veut approcher *W(x)* par la variable nodale (P1) $\hat{W}(x)$ telle que :

$$\hat{W}(x) = \sum_{k=1}^{Nbnoe} W_k N^k(x) \qquad \text{(VI.4)}$$

où les N^k sont les fonctions de forme nodales.
Pour cela, une méthode de moindres carrés est utilisée. Elle consiste à minimiser la fonction suivante :

$$\prod(W) = \sum_{e=1}^{Nbelt} vol^e \left(\sum_{k=1}^{Nbnoe} W_k N^k(\zeta^e) - W_e \right)^2 \qquad \text{(VI.5)}$$

où ζ_e sont les coordonnées barycentriques de l'élément *e* et vol^e son volume.

La deuxième étape consiste à transporter la nouvelle variable nodale $\hat{W}$ sur le nouveau maillage. Pour cela, on effectue un transport P1 comme décrit précédemment, en interpolant les valeurs non pas sur les nœuds mais sur les centres de gravité des éléments du nouveau maillage. On obtient ainsi une seule valeur pour chaque élément définissant ainsi une variable P0.

VI.2 Le transport des variables de modèles polycristallins lors du remaillage

VI.2.1 Position du problème

Lorsque la loi de comportement utilisée est calculée par un modèle polycristallin, les variables supplémentaires à transporter dans Forge3® sont :

- la texture cristallographique
- les autres paramètres du modèle polycristallin qui sont les cissions critiques et les contraintes des cristaux dans le cas du modèle polycristallin de Taylor.

Nous regrouperons par la suite l'ensemble de ces variables des modèles polycristallins sous l'appellation de texture ou encore variables polycristallines (par raccourci de langage).

Au moyen des transports décrits précédemment, on peut envisager un transport de la cission critique et de la contrainte cristalline, mais pas de la texture cristallographique. En effet une interpolation linéaire d'angles d'Euler n'a pas de sens physique. On pourrait imaginer un transport P0 plus classique qui consisterait à transporter sans la modifier la texture appartenant à l'élément *e* de l'ancien maillage sur un élément *e'* du nouveau maillage dont *e* est l'antécédent. Un tel transport n'est cependant pas conservatif, un EF de l'ancien maillage pouvant être l'antécédent de plusieurs ou d'aucun EF du nouveau maillage. Certaines orientations cristallographiques seraient alors dupliquées ou perdues. Ces différents transports ne sont donc pas envisageables.

Le formalisme des particules Lagrangiennes permet de remédier à ces difficultés.

VI.2.2 Les différentes stratégies de transport des variables de modèles polycristallins

Lors de notre étude, nous avons envisagé deux grandes classes de stratégies pour le transport des variables polycristallines lors du remaillage. La première classe consiste à calculer l'évolution des variables polycristallines uniquement sur les particules. Nous verrons que cette stratégie (stratégie 1) revient à considérer un maillage grossier et ne permet donc pas de prédire correctement l'anisotropie mécanique. Nous verrons ensuite une classe de stratégies (de type 2) où la résolution mécanique utilise l'évolution des variables polycristallines calculées sur chacun des EFs. Nous présenterons deux modèles représentant deux types d'approche que nous avons testés :

- le modèle 2A pour lequel les variables polycristallines transportées lors du remaillage sont les variables calculées au niveau des particules Lagrangiennes,

- le modèle 2B pour lequel les particules Lagrangiennes servent uniquement à délimiter les cellules sur lesquelles les informations de l'évolution des variables polycristallines sont localisées.

Dans cette section, nous présentons le principe de cette deuxième classe de stratégies et mettons en évidence leurs différences. Dans la section VI.3, nous comparerons plus particulièrement ces deux méthodes vis-à-vis de l'influence de certains paramètres (nombre de particules, nombre de remaillages) sur la prédiction d'anisotropie et l'évolution de texture. Après avoir choisi la méthode la plus adaptée vis-à-vis de ces paramètres, nous étudierons (section VI.4) l'influence de deux autres paramètres : la taille de maille et la stratégie de couplage utilisée pour la résolution mécanique.

VI.2.2.1 Première stratégie : calcul polycristallin uniquement sur les particules

VI.2.2.1.1 Principe général

Dans cette première stratégie, nous calculons la rhéologie polycristalline uniquement sur les particules positionnées dans le maillage EF et non pas sur chacun des éléments finis.

Le calcul de la rhéologie polycristalline pour chaque particule se fait une seule fois par incrément de temps, après convergence des itérations de Newton-Raphson vers le gradient de vitesse solution. Le calcul polycristallin sur chaque particule a pour donnée d'entrée le gradient de vitesse de la particule *part* à l'incrément en cours que nous notons *inc*, ce gradient de vitesse a pour composantes ∇ où

$$\nabla = \sum_{elt \in cel} \frac{Vol^{inc,elt}}{} \nabla v_{ij}^{inc,elt} \quad \text{(VI.6)}$$

est la moyenne des gradients de vitesses des éléments appartenant à la particule *part* pondérée par le poids du volume de l'élément par rapport au volume de la particule. Rappelons que le volume de la particule (ici, nous entendons par particule, la cellule qui lui est associée) est égal à la somme des volumes des éléments finis appartenant à la particule. A l'étape d'initialisation du calcul, une texture initiale est distribuée sur chaque particule.

La loi de comportement rhéologique sur l'élément fini *elt* est définie de la façon suivante :

$$s_{ij}^{inc,elt} = s_{ij}^{inc-1,elt} + \sum_{k,l} \frac{\partial}{\partial \dot{}} \Delta\dot{\varepsilon}_{kl}^{inc,elt} \quad \text{(VI.7)}$$

où l'indice *inc* est l'incrément de temps, l'indice *part* la particule à laquelle appartient l'élément *elt* considéré, $\boldsymbol{s_{ij}^{incr,elt}}$ la composante *ij* de la contrainte déviatorique à l'incrément de temps *inc* de l'EF *elt* et $\Delta\dot{\varepsilon}_{kl}^{incr,elt} = \dot{\varepsilon}_{kl}^{incr,elt} - \dot{\varepsilon}_{kl}^{incr-1,elt}$ la variation de la vittesse de déformation entre deux incréments de temps. Cette loi est à mettre en relation avec la loi utilisée dans le cas de la stratégie de couplage faible (cf. équation IV.37). Néanmoins, le module tangent utilisé est cette fois-ci celui de la particule issu du calcul polycristallin à l'incrément précédent : $\frac{\partial s_{ij}}{\partial \dot{\varepsilon}_{kl}}^{inc,elt} = \frac{\partial}{\partial \dot{}}$.

Pour initialiser le gradient de vitesse, nous utilisons au premier incrément une loi isotrope viscoplastique de type Norton-Hoff. Avant de passer à l'incrément 2, nous calculons le module tangent de chaque particule avec le modèle polycristallin en utilisant l'estimation du gradient de vitesse obtenue à l'aide de la loi de type Norton-Hoff.

A l'aide de cette stratégie, lorsqu'il y a remaillage, il faut seulement attribuer à chaque élément fini la nouvelle cellule à laquelle il appartient et réciproquement à chaque particule, l'ensemble des EFs qui lui sont associés. Pour ce faire, nous procédons de la manière suivante :

- pour chaque EF et pour chaque particule, nous calculons la distance euclidienne entre le centre de gravité de l'élément et la position de la particule,
- nous associons à chaque EF la particule pour laquelle cette distance est minimale.

Avec cette méthode d'attribution, chaque EF a une particule associée mais il se peut qu'une particule n'ait pas d'EF associé (par exemple, si deux particules se retrouvent à un moment donné dans le même élément). Pour pallier ce problème qui ne permettrait pas de pouvoir calculer l'évolution des variables microstructurales de la particule « nue », nous associons à cette particule le gradient de vitesse de l'EF auquel elle appartient.

Le schéma de principe de cette première stratégie est présenté Figure VI.2.

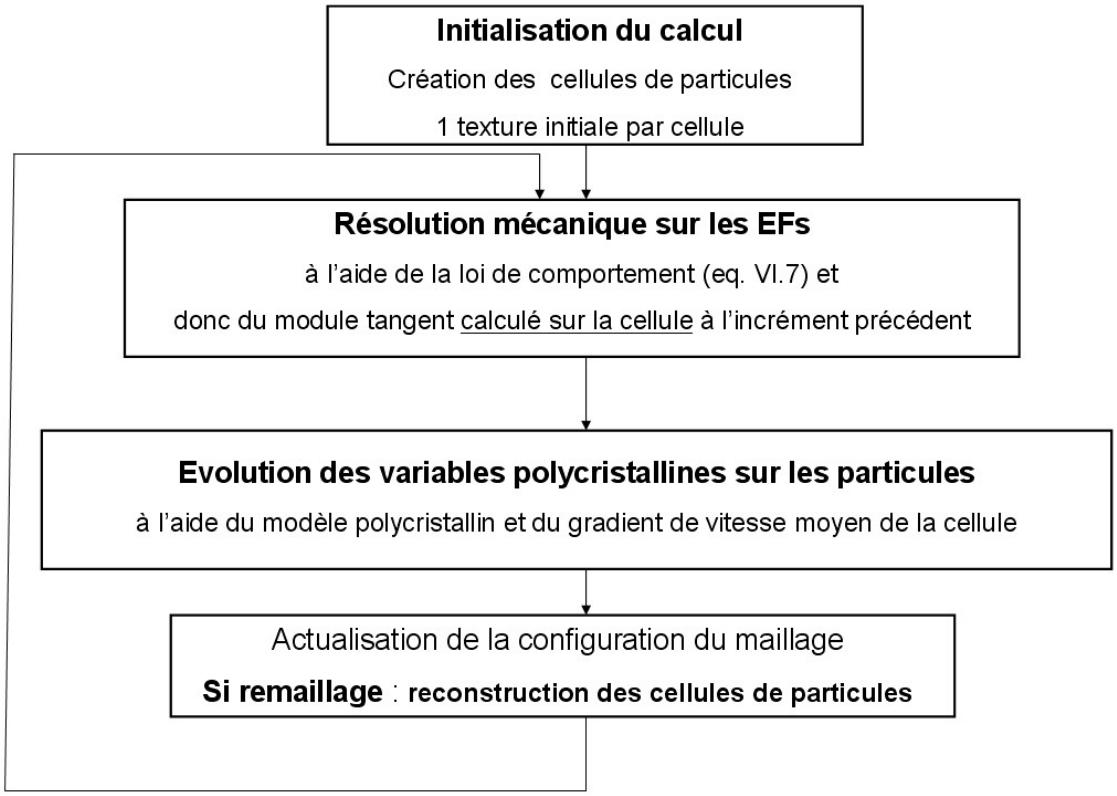


Figure VI.2 *Schéma de principe de la première stratégie.*

VI.2.2.1.2 Présentation des simulations

Nous simulons à nouveau la compression uniaxiale du cylindre avec frottement (cf . chapitre IV section IV.2.2.1). Nous considérons cette fois-ci une compression de 60% (au lieu de 45%) soit une déformation vraie de 0.9.

Nous plaçons 48 particules dans le maillage EF de la façon suivante : 3 sections dans la hauteur et 16 particules dans chaque section. Les 16 particules sont positionnées dans une section de telle sorte à avoir à peu près la même surface pour chaque cellule de particule dans la section. Les 3 sections séparent le maillage en 3 parties de volume égal.

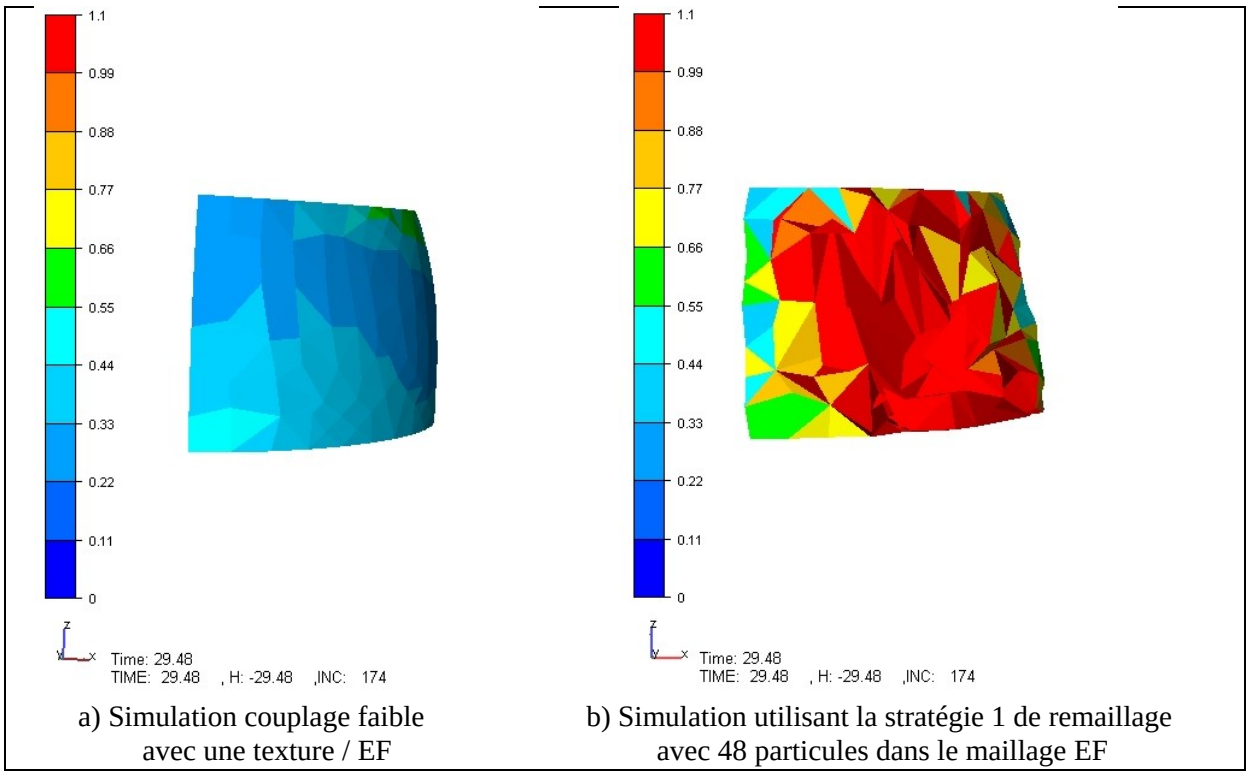
La vitesse de presse est de $1 mm.s^{-1}$ et le contrôle de la presse se fait à pas de temps constant et égal à 0.169. Le nombre d'incréments de calcul est de 355. Nous imposons un remaillage périodique

tous les 40 incréments, ce qui revient à effectuer lors de la simulation 8 remaillages. La taille de maille au remaillage est fixée à la taille moyenne du maillage initial qui est de 12 (dimensions de la pièce maillée : 100 mm de demi-hauteur et 100 mm de diamètre).

Nous allons comparer cette simulation à celle de la compression uniaxiale avec frottement sans remaillage dans le cas du « couplage faible » Forge3® / Modèle élasto-viscoplastique de type Taylor.

VI.2.2.1.3 Résultats

La Figure VI.3b) représente la répartition de la déformation équivalente sur le maillage obtenue au bout de 174 incréments de déformation soit après 4 remaillages. En comparant avec la répartition de la déformation équivalente obtenue pour la solution de couplage faible pour un même taux d'écrasement de 29.34% (Figure VI.3a), nous voyons que cette stratégie de remaillage donne des résultats totalement erronés. En effet, le profil obtenu avec la stratégie 1 montre des éléments saillants, qui représentent un mouvement local en bloc du maillage.



a) Simulation couplage faible avec une texture / EF

b) Simulation utilisant la stratégie 1 de remaillage avec 48 particules dans le maillage EF

Figure VI.3 *Répartition de la déformation équivalente dans le maillage après 174 incréments de déformation.*

VI.2.2.1.4 Discussion concernant la première stratégie

Cette méthode ne permet pas d'obtenir de bons résultats car le problème EF est trop contraint. Elle revient à considérer un maillage très grossier où les EFs seraient en fait les cellules de particules, comme le montre la Figure VI.3b). En effet, les EFs d'une même cellule vérifient le même problème de conditions aux limites. Nous ne pouvons cependant pas vérifier cette analyse dans la mesure où il n'est pas envisageable de mailler le lopin considéré à l'aide de seulement 48 EFs (48 particules étant considérées). Cette comparaison n'est donc pas envisageable, sauf dans le cas où l'on utilise un grand

nombre de particules, quasiment équivalent au nombre d'EFs, et dans ce cas on perd le gain en temps de calcul obtenu par la distribution des textures partielles sur les cellules.

De plus, sans remaillage, cette simulation présenterait les mêmes défauts caractéristiques, excepté bien sûr dans le cas où une particule serait positionnée au centre de gravité de chaque EF (on retrouverait ainsi la solution obtenue avec le couplage faible et une texture par EF).

Nous devons considérer une autre méthode où la contrainte et le module tangent sont propres à chaque EF, c'est-à-dire en gardant les degrés de liberté du problème.

VI.2.2.2 Deuxième stratégie : calcul polycristallin sur les EFs

A l'aide des résultats obtenus pour la stratégie 1, nous comprenons l'importance de faire un calcul rhéologique polycristallin sur chaque EF. Nous pouvons envisager deux rôles différents pour les particules Lagrangiennes :

- les particules peuvent représenter l'évolution moyenne de la texture des EFs appartenant à la cellule. Le calcul polycristallin est mené aussi sur les particules afin d'obtenir le comportement moyen représentatif des EFs de la cellule. C'est la méthode 2A.
- les particules peuvent être considérées uniquement comme des marqueurs. Les données concernant l'évolution des variables polycristallines associées aux EFs d'une même cellule sont associées à la particule définissant la cellule. Les calculs polycristallins se font donc uniquement sur les textures partielles de chacun des EFs. C'est la méthode 2B.

Nous allons ici présenter en détail ces deux méthodes et ce qui les distingue. Toutes deux permettent le transport des variables polycristallines lors du remaillage.

VI.2.2.2.1 Principe général des deux méthodes

La méthode 2A consiste à effectuer un calcul polycristallin sur les EFs et sur les particules. Le calcul polycristallin sur les particules permet d'obtenir les variables polycristallines représentatives du comportement moyen de chaque cellule. Ensuite, lors du remaillage, ce sont les variables polycristallines représentatives du comportement moyen des cellules et non pas les variables polycristallines associées aux EFs qui sont redistribuées (aléatoirement) sur la cellule.

Dans le cas de la méthode 2B, le calcul polycristallin se fait uniquement sur les EFs et le rôle des particules est réduit au rôle de marqueur. Ainsi, dans le cadre de cette stratégie, ce sont les données des variables polycristallines calculées sur les EFs qui sont transportées.

Le principe des deux méthodes est détaillé ci-dessous :

- <u>les données d'entrée :</u>
  - texture initiale du matériau
  - paramètres de la loi polycristalline
  - nombre de particules dans le maillage EF, noté p
  - nombre de textures à distribuer dans le maillage initial, noté N.

- <u>l'étape d'initialisation</u> :

Les p particules sont positionnées dans le maillage EF. Pour chaque particule, nous définissons la cellule correspondante.

Pour attribuer les orientations aux EFs, nous utilisons la méthode de distribution selon le volume (cf. chapitre V section V.5.1.1.1 et chapitre III section III.2.3) :

- Nous distribuons N textures cristallographiques initiales sur les p particules proportionnellement aux volumes des particules (c'est-à-dire celui des cellules associées aux particules).

- Pour chaque particule *part*, nous distribuons les n_{part} textures cristallographiques attribuées à la particule sur les EFs de la cellule correspondante, proportionnellement aux volumes de ces EFs.

A chaque EF sont donc associés une texture partielle et les paramètres de la loi polycristalline.

Méthode 2A. Au niveau de chaque particule, nous considérons une texture cristallographique initiale et les paramètres de la loi polycristalline.

- à l'incrément de calcul *incr* :

On calcule l'évolution mécanique et microstructurale au niveau des EFs selon le type de couplage (faible ou fort) choisi. S'il y a eu un remaillage à l'incrément précédent, nous forçons l'utilisation du couplage fort afin de pallier les perturbations induites par la modification des textures partielles au niveau des EFs, les orientations liées à la particule ayant été redistribuées aléatoirement et selon le volume des éléments dans la nouvelle cellule.

Méthode 2A. On effectue au niveau de la particule un calcul polycristallin en utilisant la texture associée à la particule et le gradient de vitesse de la particule calculé d'après l'équation VI.6. Ce calcul permet de connaître l'évolution moyenne des données microstructurales de la cellule. Suivant le degré d'hétérogénéité du gradient de déformation des EFs dans une cellule, la texture associée à la particule va plus ou moins fidèlement correspondre à la texture formée par les textures partielles des EFS. Ici, la texture associée à la particule a la taille de la texture initiale.

Méthode 2B. Pour connaître l'évolution des textures sur les différentes cellules, nous regroupons les données d'évolution des textures partielles des EFs appartenant à une même cellule au niveau de la particule. Nous appellerons cette nouvelle donnée la texture associée à la particule. Ici, la texture associée à la particule *part* a n_{part} fois la taille de la texture initiale.

Dans le cas où il y a remaillage, de nouveaux EFs sont générés. Les cellules des particules sont réactualisées.

Méthode 2A. Pour chaque particule *part*, nous distribuons selon le volume n_{part} fois la texture associée à la particule sur les EFs.

Méthode 2B. Pour chaque particule *part*, nous distribuons selon le volume la texture associée à la particule sur les EFs.

De nouvelles textures partielles sont ainsi associées aux EFs.

Les schémas de principe de ces deux méthodes sont présentés Figure VI.4 et Figure VI.5.

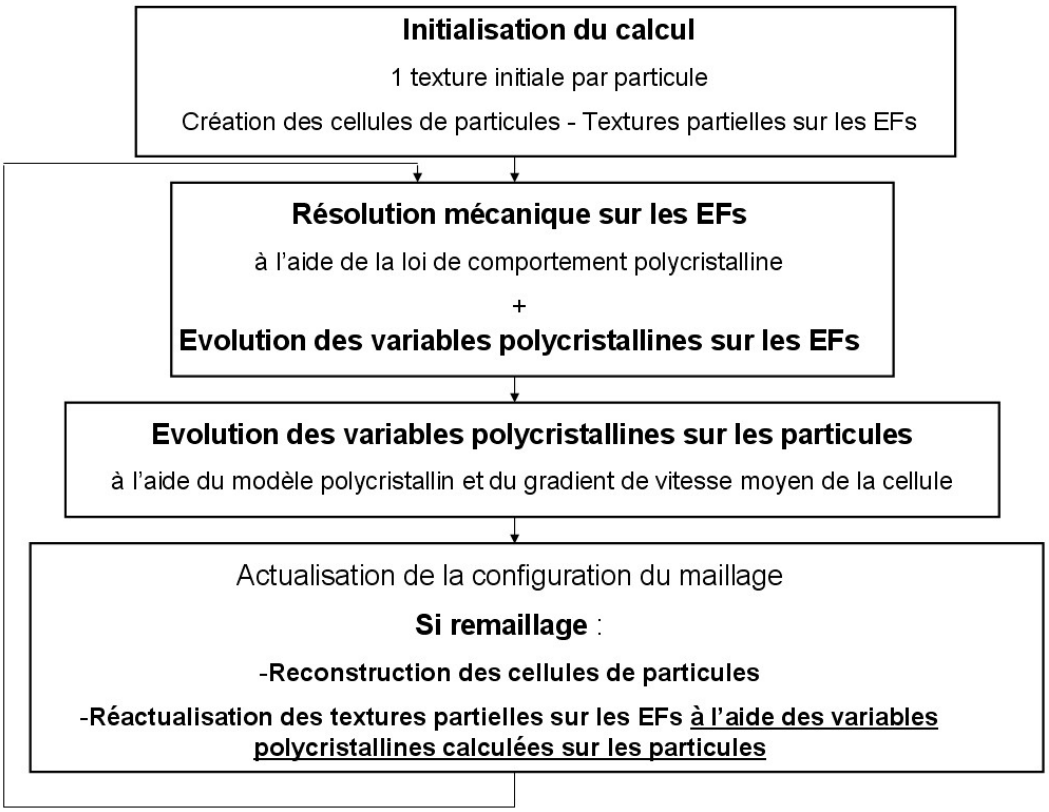


Figure VI.4 *Schéma de principe de la méthode 2A stratégie de couplage fort.*

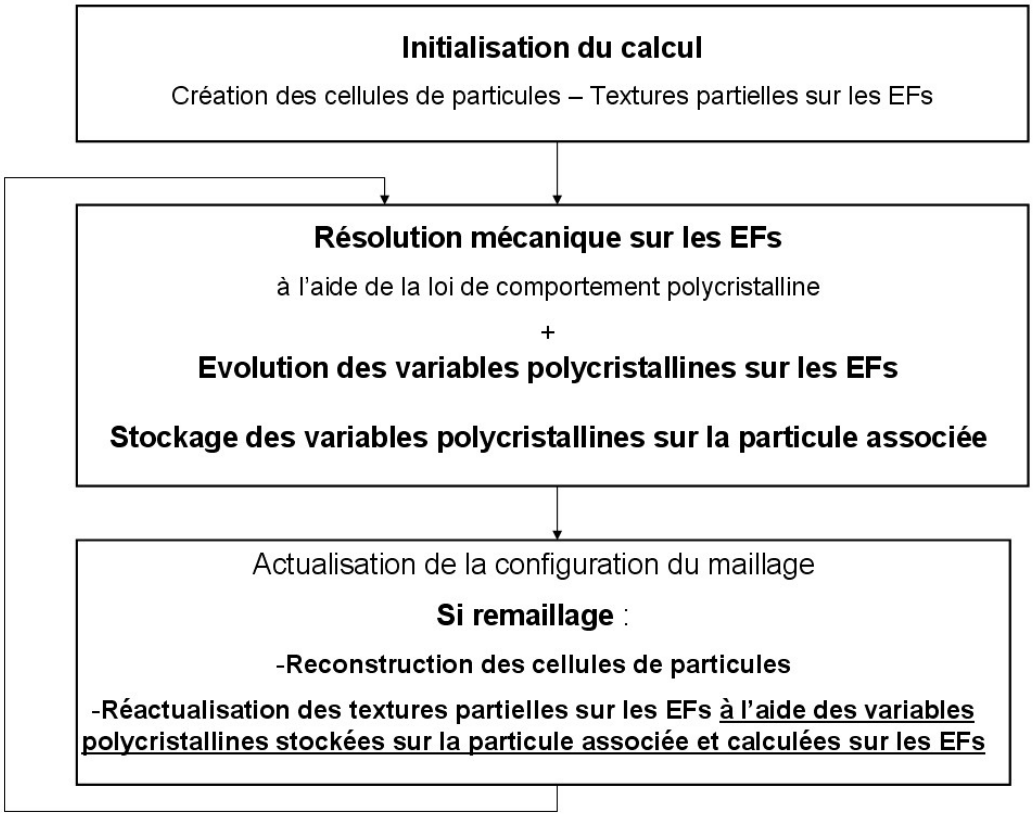


Figure VI.5 *Schéma de principe de la méthode 2B stratégie de couplage fort.*

VI.2.2.2.2 Intérêt des deux méthodes

L'utilisation du couplage fort pour la résolution mécanique sur les EFs après une opération de remaillage est nécessitée par le renouvellement des textures partielles sur les EFs. La loi de comportement rhéologique (équation IV.36) du couplage faible, utilisant la contrainte à l'incrément précédent, n'a plus de sens physique car chaque élément a changé de numérotation, et de comportement puisqu'il est associé à une nouvelle texture partielle, différente de celle de l'incrément précédent. Dans le cas du couplage fort, la contrainte est recalculée à l'aide du modèle polycristallin, elle prend donc en compte les nouvelles textures partielles.

Méthode 2A. L'hypothèse de changement d'échelle du modèle de Taylor est la suivante : la déformation cristalline est la même pour tous les cristaux et est égale à la déformation macroscopique. La distribution des orientations issues du calcul polycrystallin sur une cellule a donc un sens dans la mesure où :

- la déformation cristalline est la même pour tous les cristaux représentatifs de la texture (au niveau de la particule)
- l'écart entre la déformation macroscopique associée à l'EF et la déformation des cristaux représentatifs est minimisé car la déformation des cristaux représentatifs est égale à la déformation moyenne des EFs de la cellule.

Néanmoins, les orientations cristallographiques réparties sur les EFs sont modifiées lors du remaillage. La différence entre ces nouvelles orientations et les orientations avant remaillage dépend de l'hétérogénéité de déformation dans la cellule.

Méthode 2B. Les nouvelles textures partielles sur les EFs correspondent à des orientations cristallographiques pouvant avoir subi des déformations cristallines différentes. Ces différences dépendent de l'hétérogénéité de déformation dans la cellule. Les orientations cristallines associées à un même EF après remaillage n'ont pas toutes subi la même quantité de déformation. L'écart à l'hypothèse de Taylor peut dans certaines configurations être assez important. Néanmoins, les orientations représentatives de la cellule ne sont pas modifiées après remaillage : elles sont juste redistribuées.

Les 2 méthodes présentent donc des approximations. La méthode 2A permet de mieux respecter l'hypothèse de Taylor tandis que la méthode 2B permet, elle, de conserver exactement les orientations cristallographiques d'une cellule après remaillage.

Du point de vue du temps de calcul des simulations, la méthode 2A génère des temps de calcul à priori plus importants dans la mesure où le calcul polycristallin est mené aussi sur les particules, et pas seulement sur les EFs. L'augmentation du temps de calcul de la méthode 2A par rapport à la méthode 2B sera donc fonction du nombre de particules considérées dans le maillage EF.

Ces deux méthodes sont a priori sensibles au nombre et à la position des particules dans le maillage EF ainsi qu'à la fréquence de remaillage. Dans la prochaine section, nous étudions l'influence de ces deux paramètres et vérifions si les approximations que nous avons faites sont acceptables.

VI.3 Comparaison des méthodes 2A et 2B

Au vu des différences exposées précédemment entre les deux stratégies, nous allons étudier l'influence des deux paramètres :

- nombre de remaillages au cours de la simulation,
- nombre de particules dans le maillage,

sur la prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture en fonction de la méthode de transport utilisée (méthode 2A ou méthode 2B).

VI.3.1 Présentation des simulations

Nous simulons à nouveau la compression uniaxiale du cylindre avec frottement pour un taux d'écrasement de 60% (dimensions de la pièce maillée : 100mm de demi-hauteur et 100mm de diamètre). La simulation de référence est la simulation couplage fort avec une texture par EF sans remaillage (cf. section IV.2.2).

La stratégie de couplage utilisée pour les deux méthodes de transport des variables polycristallines est la stratégie de couplage fort.

Nous avons étudié trois nombres de particules dans le maillage : 1, 27 et 48 en gardant constant et égal à 66 le nombre de textures distribuées dans le maillage EF. A l'étape d'initialisation, nous avons, pour un même nombre de particules, la même distribution des orientations dans les EFs quelle que soit la méthode de transport utilisée.

Nous avons aussi étudié deux nombres de remaillages : 5 et 20. Lors des simulations, la vitesse de la presse est de $1 mm.s^{-1}$ et le contrôle de la presse qui impose la compression se fait à pas de temps constant de 0.3 s. Le nombre d'incréments de temps au cours des simulations est donc de 200. Nous avons imposé un remaillage périodique tous les 40 incréments (soit pour $\Delta\varepsilon = 12\%$ de taux d'écrasement) pour avoir 5 remaillages au cours de la simulation et un remaillage périodique tous les 10 incréments (soit pour $\Delta\varepsilon = 3\%$ de taux d'écrasement) pour avoir 20 remaillages au cours de la simulation.
Le remaillage est imposé à taille de maille constante égale à 12mm, qui correspond à la taille de maille initiale dans le maillage EF. La taille et le nombre total des éléments finis dans le maillage ne va donc pas beaucoup varier au cours des simulations. Nous pouvons ainsi considérer que le volume des cellules et le nombre d'EFs dans chaque cellule varie très peu au cours de la simulation. Cette hypothèse nous permet de garder constant, au cours de la simulation avec remaillage, le nombre de textures distribuées dans chaque cellule.

VI.3.2 Résultats en terme de prédiction d'anisotropie et d'évolution de texture

Lors de la compression selon l'axe du cylindre d'un matériau cylindrique à texture orthotrope, la section transverse au départ circulaire tend vers une ellipse. Le rapport d'ovalisation est défini comme suit :

$$OV = \frac{L\max - L\min}{L\min}$$

où $L\max$ correspond à longueur du grand axe de l'ellipse et $L\min$ à la longueur du petit axe de l'ellipse.
Pour comparer les simulations en terme de prédiction d'anisotropie, nous étudions ce rapport d'ovalisation.

La compression ayant lieu avec frottement, le rapport d'ovalisation varie selon la hauteur de l'éprouvette : il diminue lorsque l'on s'approche du haut de l'éprouvette et est maximal au centre de l'éprouvette.

Afin d'étudier la prédiction d'anisotropie mécanique, nous étudions:

- l'évolution du rapport d'ovalisation à mi-hauteur (h=0) au cours de la déformation,
- le rapport d'ovalisation à différentes hauteurs (h=0,5,10,15,20,25,30 et 35) pour le taux de compression maximal de 60% (avec hmax = 40).

La hauteur h est schématisée Figure VI.6 ainsi que les longueurs des axes pour h=0.

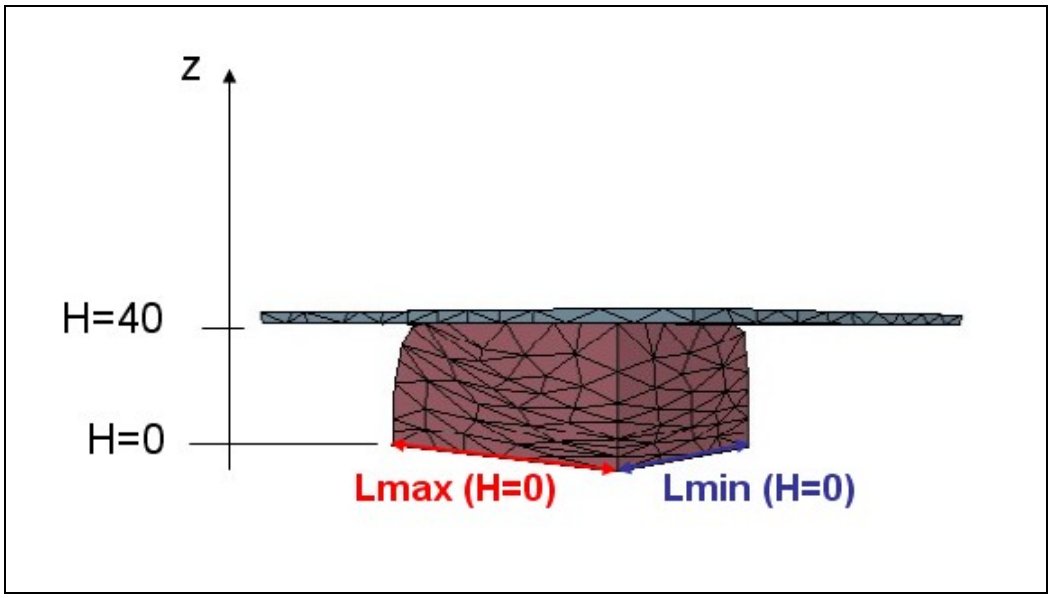


Figure VI.6 *Vue des différentes hauteurs de mesure du rapport d'ovalisation. Le lopin comprimé à 60% a une hauteur de 40 mm.*

L'étude de l'évolution de la texture cristallographique dépend des simulations.

VI.3.2.1 Influence du nombre de particules dans le maillage EF

Dans un premier temps, nous étudions la prédiction du rapport d'ovalisation dans le cas où une seule particule est positionnée dans le maillage EF, afin de mettre en évidence la nécessité pour les simulations avec remaillage de considérer un nombre de particules supérieur à 1 quelle que soit la méthode de transport utilisée.

Ensuite, nous étudions l'influence du nombre de particules (ici 27 et 48) positionnées dans le maillage EF sur la prédiction de texture et d'anisotropie mécanique.

Les paramètres de l'ensemble de ces simulations sont :

- la stratégie de couplage utilisée pour la résolution mécanique (couplage fort),
- le nombre de textures distribuées dans le maillage EF (égal à 66),
- le nombre de remaillages (égal à 5 soit tous les 12% de taux de compression de la presse),
- la taille de maille égale à la taille de maille initiale (soit 12mm).

VI.3.2.1.1 Une seule particule positionnée dans le maillage EF

L'évolution du rapport d'ovalisation calculée à h=0 en fonction du taux de compression est illustrée FigureVI.7.

Afin d'évaluer l'influence du remaillage, comparons tout d'abord le graphe des carrés (1 particule – sans remaillage) aux deux graphes des triangles (1 particule – remaillage). Les points restent naturellement confondus jusqu'à 12% de compression (pas de remaillage). A 15% de compression, un premier remaillage a eu lieu et les triangles se sont décalés par rapport au carré. Ce décalage évolue continûment jusqu'à 24% de compression. A 27%, après un deuxième remaillage, un saut se produit. L'influence du remaillage suivant est moins évidente. Cette première comparaison souligne l'influence croissante du remaillage, l'hétérogénéité de déformation dans le lopin augmentant avec le taux d'écrasement.

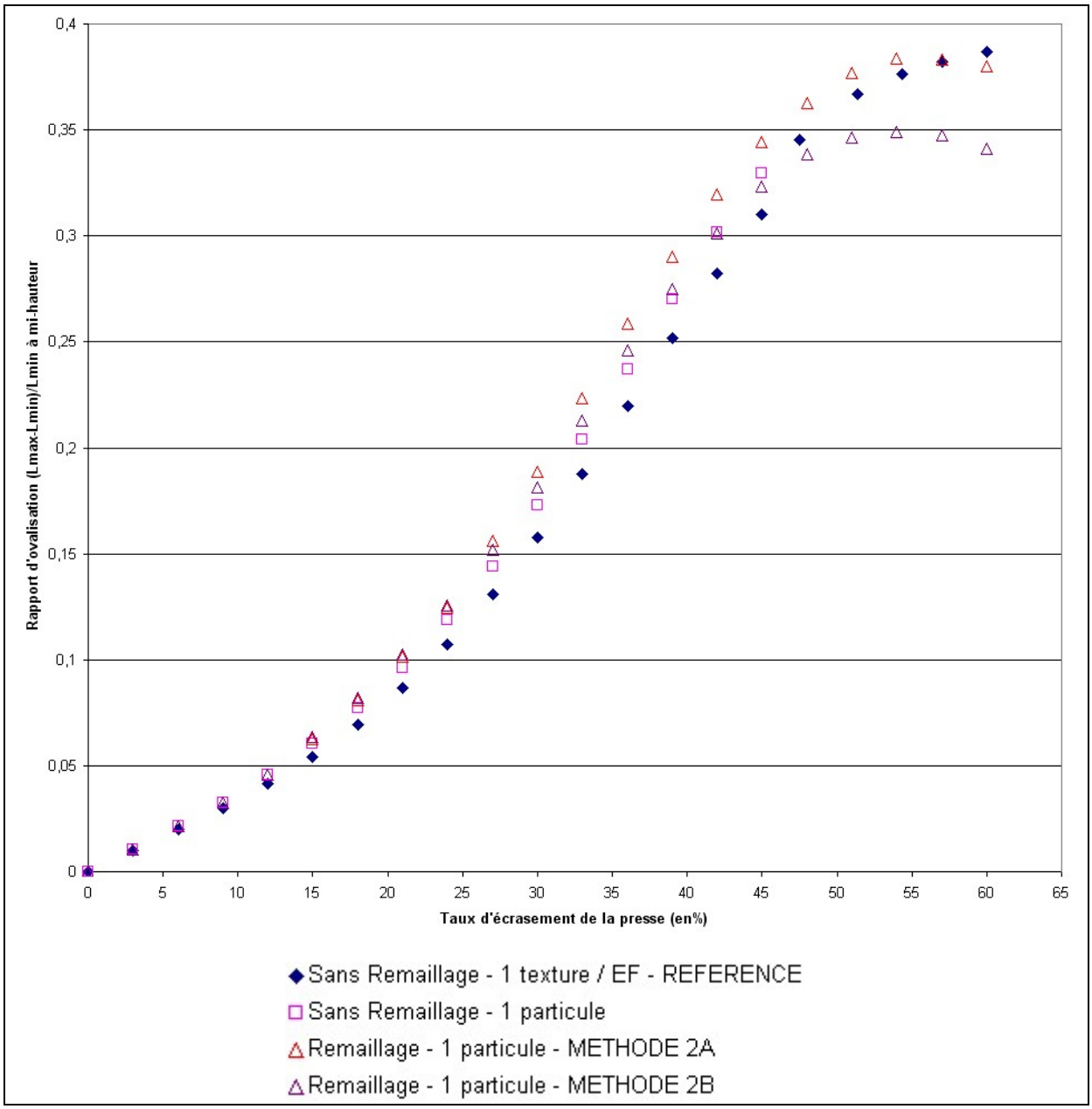


Figure VI.7 *Comparaison de l'évolution du rapport d'ovalisation mesuré à h=0 au cours de la compression – 1 seule particule positionnée dans le maillage EF.*

Comparons à présent les simulations à la simulation de référence. La simulation sans remaillage s'écarte tout d'abord régulièrement de la référence, l'écart tendant ensuite à se stabiliser. Les simulations avec remaillage subissent tout d'abord des sauts à l'issue des premiers remaillages, puis tendent à un comportement plus homogène (le rapport d'ovalisation finit même par être plus faible que celui de référence) du fait des mélanges ou des moyennes effectués lors des remaillages. Lorsque la déformation évolue, l'hétérogénéité de déformation dans le lopin augmente et les évolutions de texture varient plus d'un EF à l'autre. Avec la méthode 2A, l'évolution de texture sur la particule est calculée à l'aide du niveau de déformation moyen de l'ensemble des EFs du maillage entier, elle tend donc à gommer les hétérogénéités de déformation. La méthode 2B engendre, lors du remaillage, des mélanges de textures qui ne prennent pas en compte le niveau de déformation des cristaux : des orientations cristallographiques représentant une texture partielle très déformée peuvent donc se retrouver sur des zones peu déformées.

Les résultats concernant l'ovalisation à différentes hauteurs pour la déformation finale sont reportés Figure VI.8. Nous voyons que pour la simulation de référence, le rapport d'ovalisation diminue lorsque la hauteur augmente. Lorsqu'il y a remaillage, le rapport d'ovalisation ne vérifie pas cette propriété caractéristique, il n'est donc pas correct. Nous obtenons une différence maximale sur la prédiction du rapport d'ovalisation par rapport à la simulation de référence de 16% (h=35) pour la méthode 2A et de 11.8% (h=0) pour la méthode 2B. Ces différences ainsi que l'absence marquée de monotonie des courbes invalident les simulations avec remaillage et une seule particule, en terme de prédiction d'anisotropie mécanique.

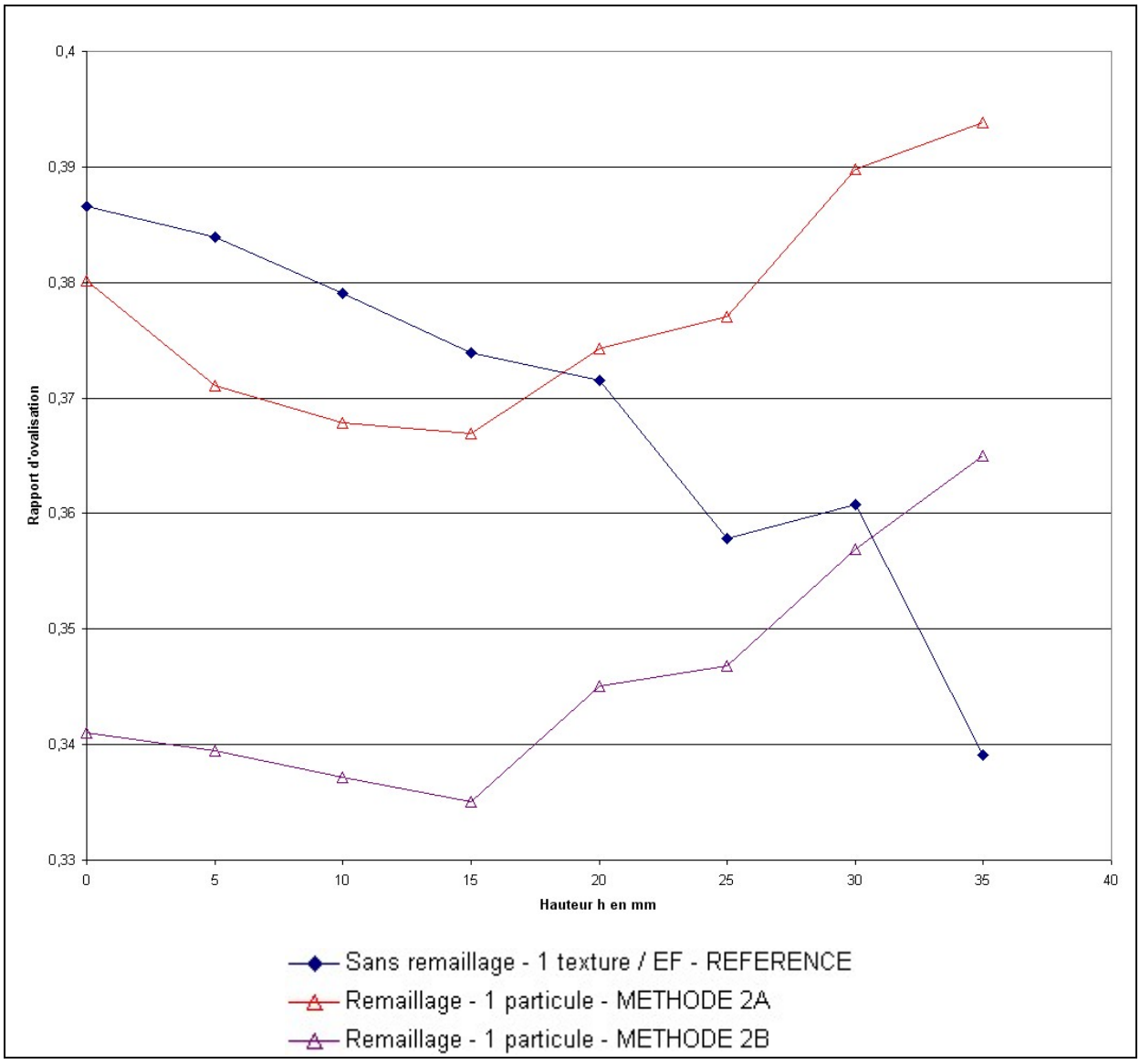


Figure VI.8 *Evolution du rapport d'ovalisation à différentes hauteurs h (cf. Figure VI.6) pour le taux de compression final de 60%.*

L'évolution de la texture cristallographique est étudiée pour la déformation vraie moyenne de 0.9 (soit le taux de compression final de 60%) sur deux zones : une zone très déformée et une zone peu déformée. Les textures sur ces deux zones sont définies de la façon suivante :

- la texture de la zone très déformée est la texture des éléments finis dont la déformation équivalente est supérieure à 1.1 (texture de la bande de localisation induite par le frottement),
- la texture de la zone peu déformée est la texture des éléments finis dont la déformation équivalente moyenne est inférieure à 0.5 (zones « mortes »).

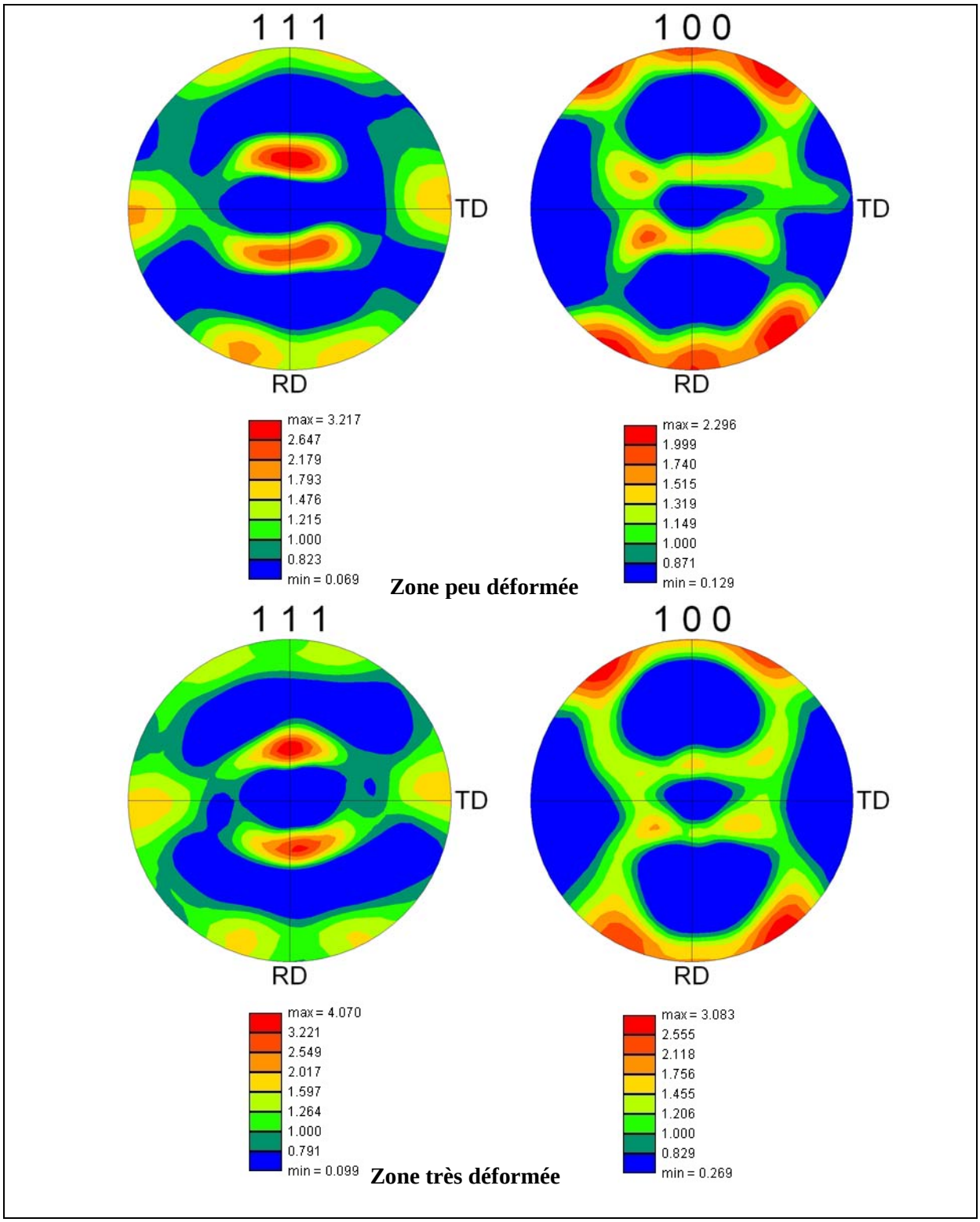


Figure VI.9 *Figures de pôle {111} et {100} dans la zone très déformée (281 EFs) et dans la zone peu déformée (122 EFs) pour le taux de compression finale de 60% et la simulation sans remaillage avec 1 texture par EF. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

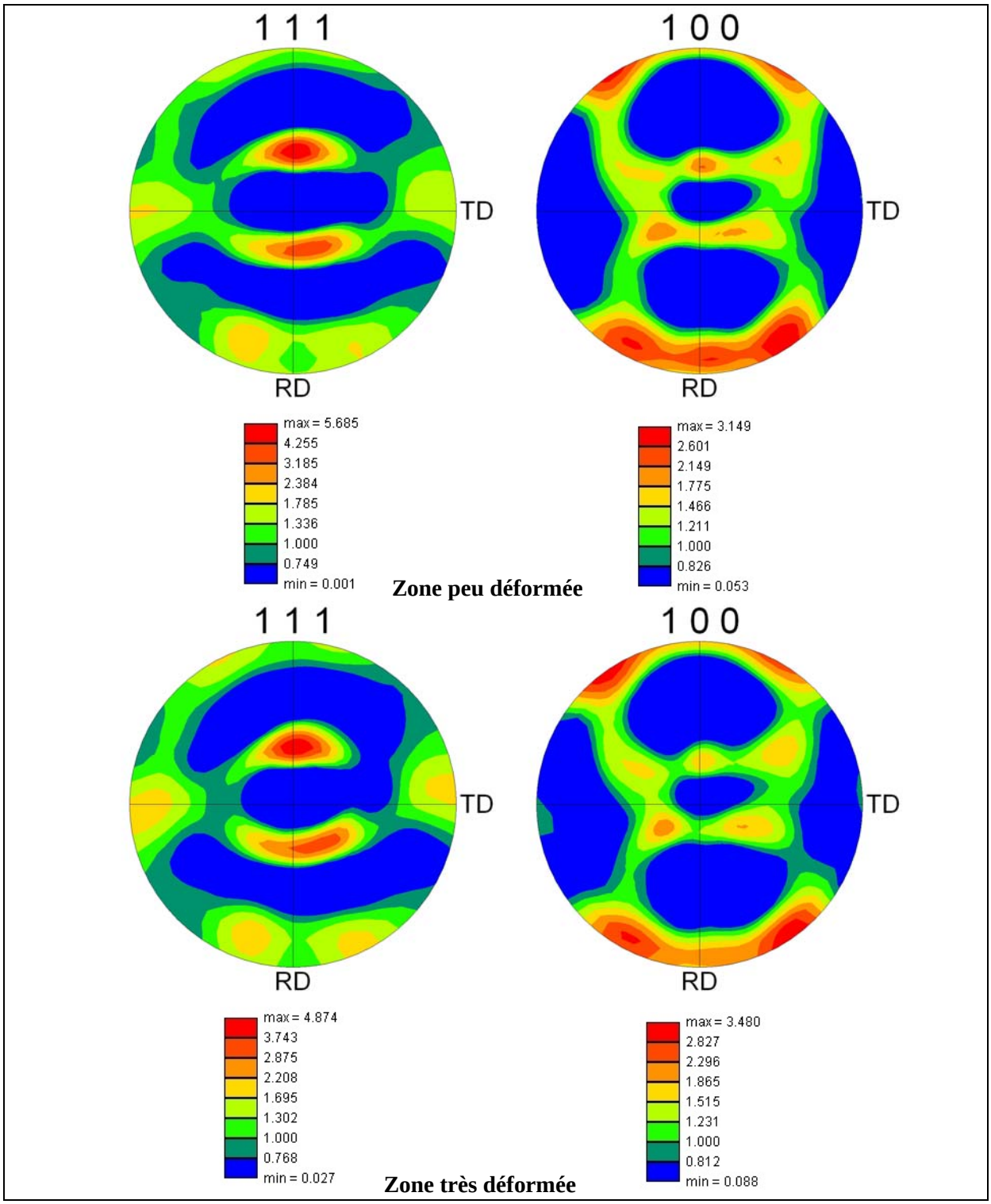


Figure VI.10 *Figures de pôle {111} et {100} dans la zone très déformée (278 EFs) et dans la zone peu déformée (126 EFS) pour le taux de compression finale de 60% et la simulation avec 5 remaillages et 1 particule METHODE 2A.ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

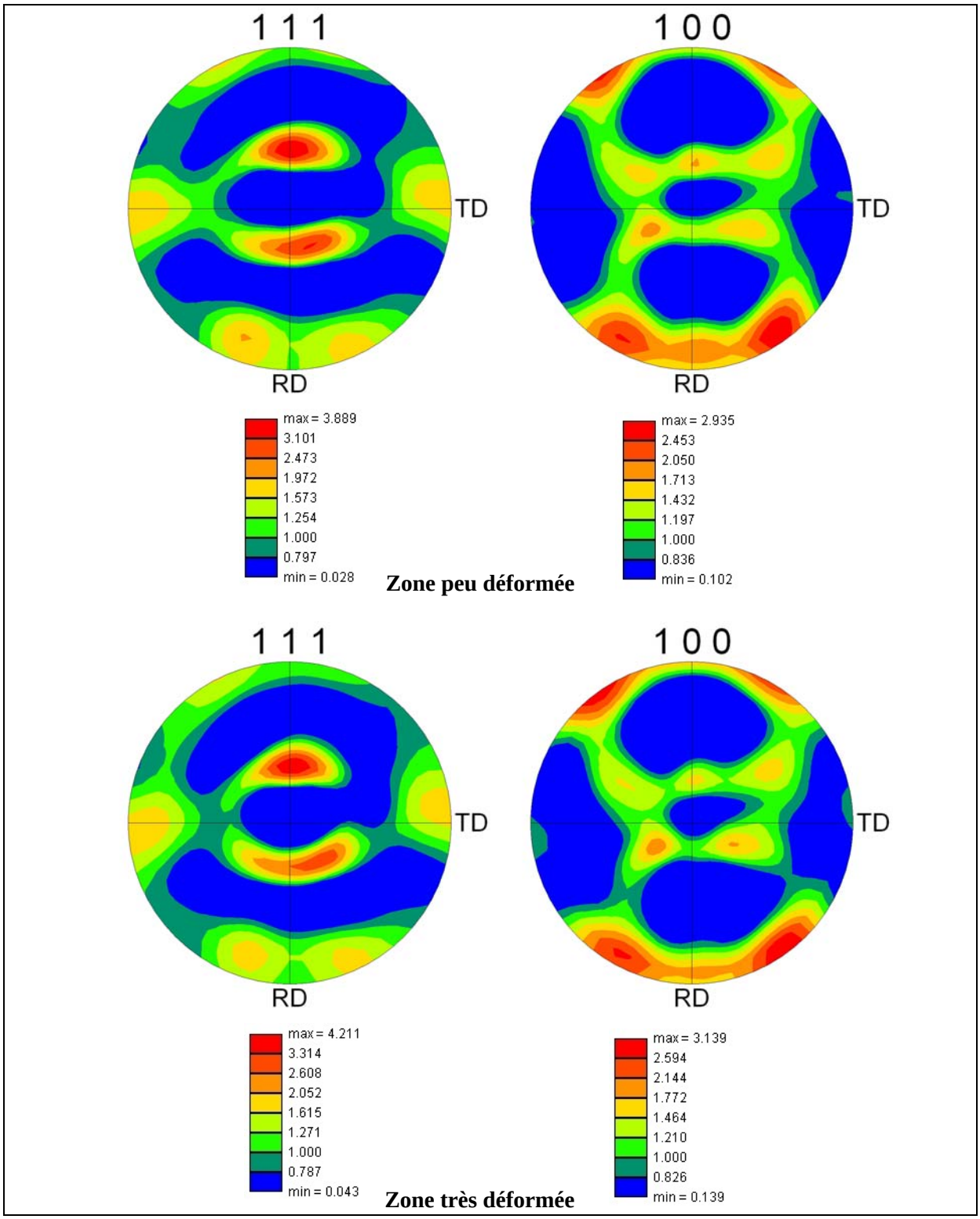


Figure VI.11 *Figures de pôle {111} et {100} dans la zone très déformée (239 EFs) et dans la zone peu déformée (136 EFs) pour le taux de compression finale de 60% et la simulation avec 5 remaillages et 1 particule METHODE 2B. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

Les figures de pôle {111} et {100} obtenues dans les différentes zones sont représentées Figure VI.9 pour la simulation de référence, Figure VI.10 pour la méthode 2A et Figure VI.11 pour la méthode 2B. La comparaison des Figures VI.10 et VI.11 à la Figure VI.9 montre que l'évolution de texture cristallographique n'est pas correctement prédite. Ce résultat est en accord avec le fait que

l'anisotropie mécanique n'est pas correcte pour les simulations avec une seule particule et les méthodes 2A et 2B.
Si nous examinons en détail, les figures de pôle obtenues dans le cas de la méthode 2A sont relativement semblables quelque soit la zone représentée. Il en est de même des figures de pôle obtenues pour la méthode 2B. Ce phénomène traduit le fait qu'avec une seule particule lors du remaillage, les textures sont mélangées dans les EFs du maillage de façon aléatoire. Des textures représentatives de zones relativement déformées peuvent donc se retrouver dans des zones dont la déformation est beaucoup plus faible et leur évolution s'en trouve ainsi modifiée.

Aussi bien pour la prédiction d'anisotropie mécanique que pour celle de l'évolution de texture, on ne peut se contenter de considérer une seule particule pour les simulations avec remaillage.

VI.3.2.1.2 Différents nombres de particules dans le maillage EF

Pour comparer l'influence du nombre de particules dans le maillage EF, nous avons positionné 27 et 48 particules.

Les résultats concernant l'évolution du rapport d'ovalisation à mi-hauteur du lopin (H=0 Figure VI.6) en fonction du taux de compression sont reportés Figure VI.12. Les tendances des courbes sont correctes, excepté en fin de déformation pour la méthode 2A avec 27 particules. Les courbes les plus proches de la simulation de référence sont les courbes obtenues avec 48 particules. Dans ce cas, les cellules représentent des zones plus homogènes en déformation. Si l'on compare les résultats obtenus avec ceux de la Figure VI.7, nous pouvons en conclure qu'augmenter le nombre de particules dans le maillage EF permet de mieux prédire l'anisotropie mécanique.

Regardons l'évolution du rapport d'ovalisation pour le taux de compression final en fonction de la hauteur du lopin (Figure VI.13). Les courbes ont toutes la même tendance (diminution du rapport d'ovalisation lorsque la hauteur augmente) excepté encore une fois la courbe représentant la méthode 2A avec 27 particules. Les différences maximales obtenues par rapport à la simulation de référence sont de :

- 4.75% pour la simulation avec 48 particules et la méthode 2A obtenue pour h=30,
- 5.94% pour la simulation avec 48 particules et la méthode 2B obtenue pour h=30,
- 7.3% pour la simulation avec 27 particules et la méthode 2A obtenue pour h=10,
- 8.3% pour la simulation avec 27 particules et la méthode 2B obtenue pour h=30.

Pour toutes les simulations, l'erreur commise sur le rapport d'ovalisation est strictement inférieure à 8.3% et augmente lorsque le nombre de particules diminue dans le maillage EF. Ces simulations représentent donc une amélioration en comparaison de celles avec une seule particule où l'erreur était strictement supérieure à 11.8%.

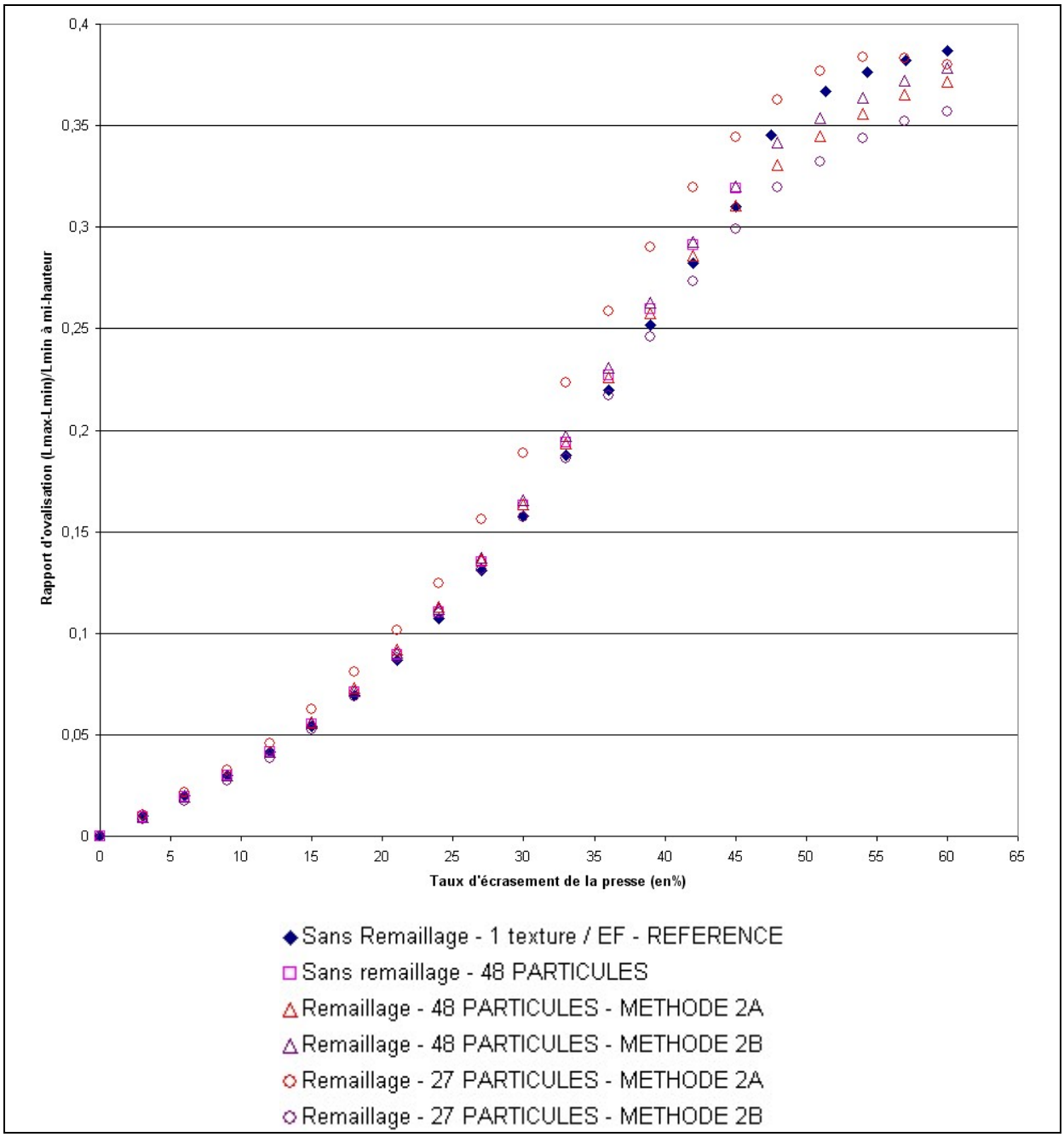


Figure VI.12 *Influence du nombre de particules sur la prédiction d'anisotropie.*

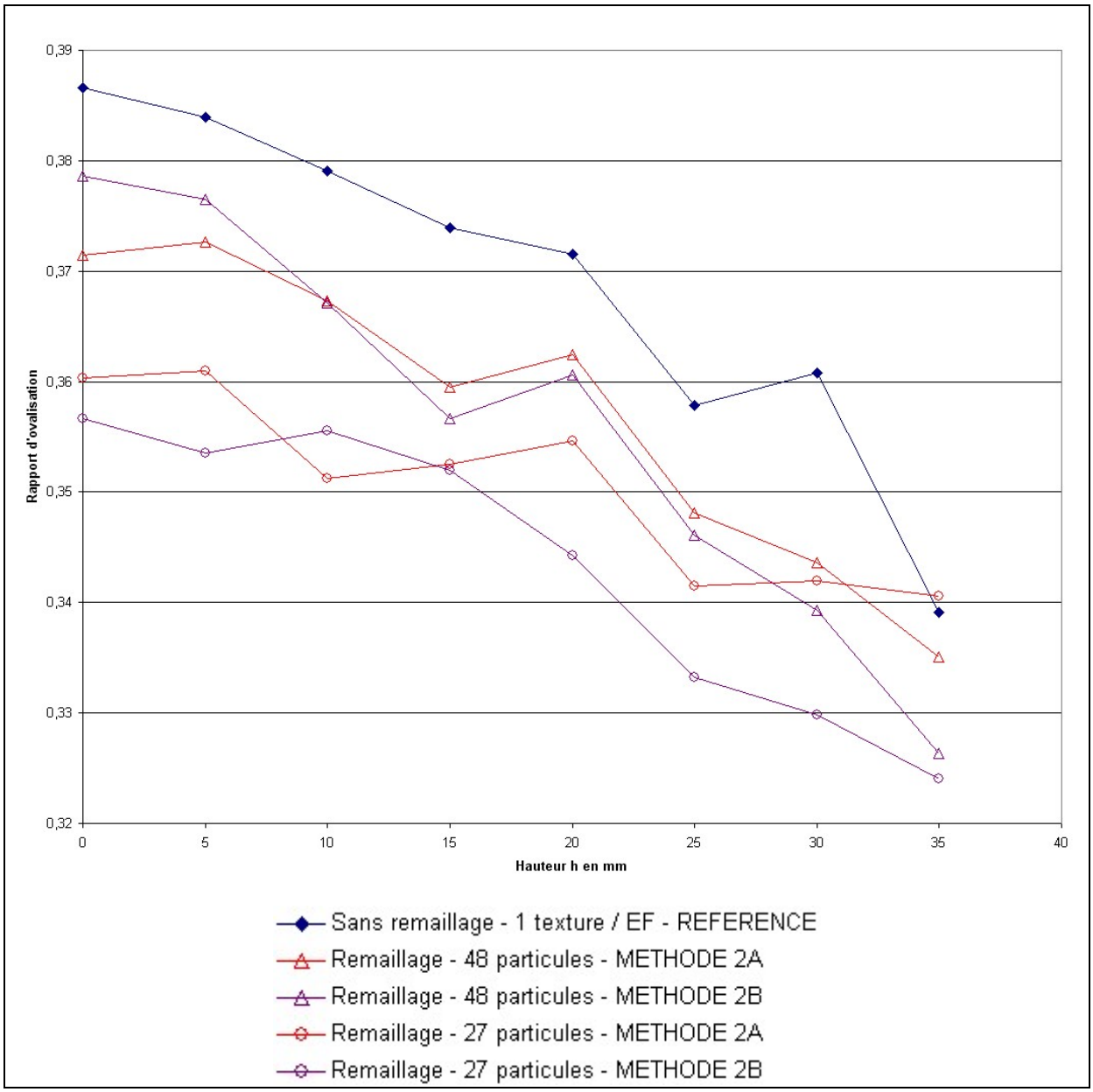


Figure VI.13 *Evolution du rapport d'ovalisation à différentes hauteurs h pour le taux de compression finale de 60% en fonction du nombre de particules considérées dans le maillage EF.*

Etudions l'évolution de texture obtenue dans les différentes zones avec 48 particules. Les figures de pôle {111} et {100} sont représentées Figure VI.14 pour la méthode 2A et Figure VI.15 pour la méthode 2B. Contrairement aux résultats obtenus avec une seule particule, nous remarquons que les figures de pôle sont différentes selon le niveau de déformation considéré. De plus, si nous comparons ces figures avec les figures de pôle de référence (cf. Figure VI.9), la forme des figures de pôle est bonne, et meilleure que celles prédites avec une seule particule (cf. Figures VI.10 et VI.11).
Remarque : les intensités des figures de pôle sont légérèment supérieures à celles de la simulation de référence, ceci pouvant notamment s'expliquer par le nombre moins élevé d'orientations utilisées pour construire la figure de pôles. On notera toutefois que les intensités de la Figure VI.15 (Méthode 2B) sont plus proches de celles de la simulation de référence.

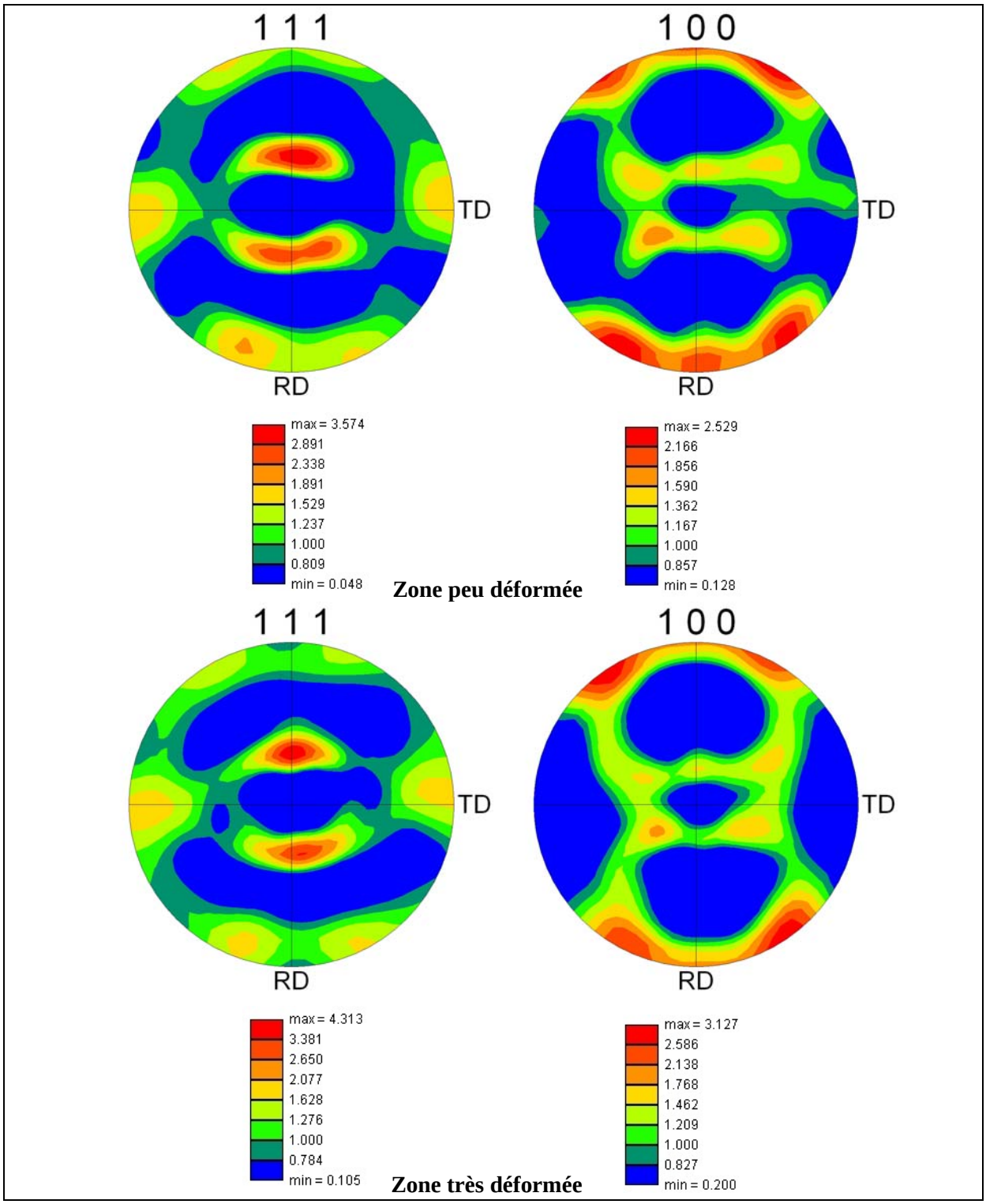


Figure VI.14 *Figures de pôle {111} et {100} dans la zone très déformée (266 EFs) et dans la zone peu déformée (109 EFs) pour le taux de compression finale de 60% et la simulation avec 5 remaillages et 48 particules METHODE 2A. ND estrelié à z, RD à x et TD à y.*

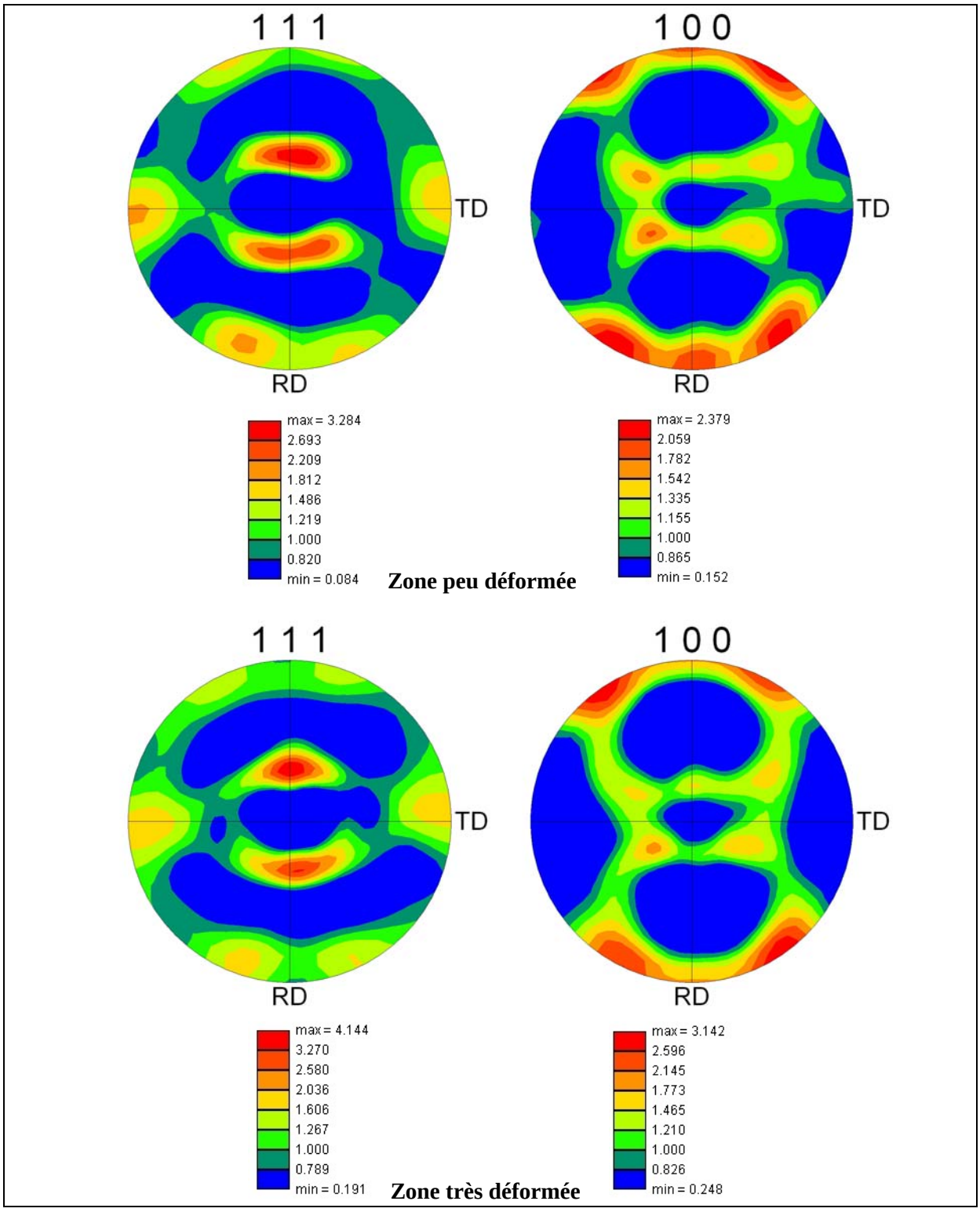


Figure VI.15 *Figures de pôle {111} et {100} dans la zone très déformée (260 EFs) et dans la zone peu déformée (109 EFS) pour le taux de compression finale de 60% et la simulation avec 5 remaillages et 48 particules METHODE 2B. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

Augmenter le nombre de particules permet de diminuer la taille des cellules. Lors du remaillage, les redistributions des variables polycristallines ont lieu sur des zones plus petites et de déformation plus homogène. L'information sur l'évolution de texture reste prescrite dans des zones de

déformation quasi-homogènes, améliorant la prédiction de l'évolution de la texture cristallographique et de l'anisotropie mécanique induite.

VI.3.2.2 Influence du nombre de remaillages

Pour analyser l'influence du nombre de remaillages sur la prédiction d'anisotropie mécanique, nous étudions deux nombres de remaillages (5 et 20) soit un remaillage tous les 12% de taux de compression de la presse et tous les 3%. Nous gardons constant et égal à 48 le nombre de particules.

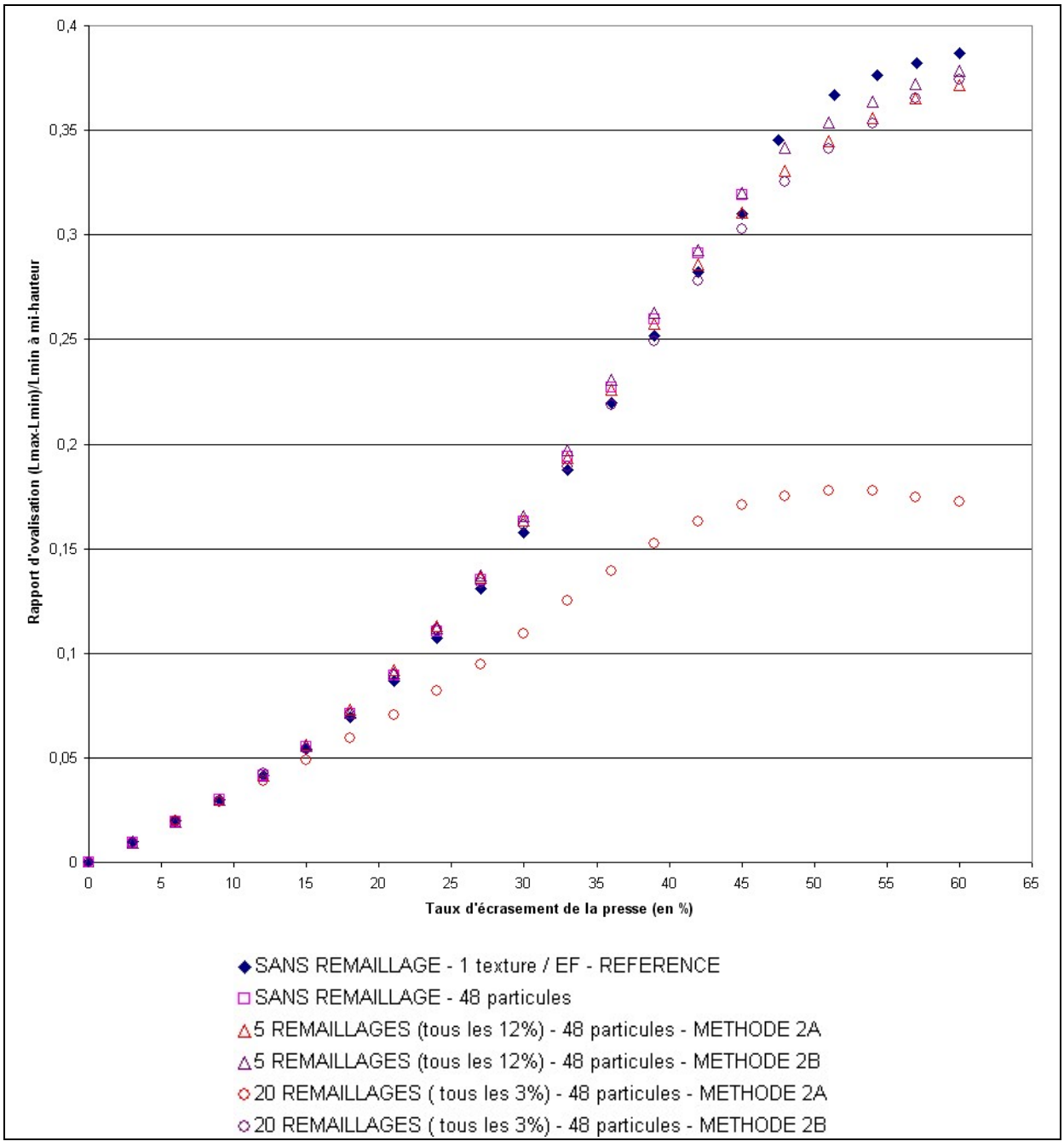


Figure VI.16 *Influence du nombre de remaillages au cours de la simulation sur la prédiction d'anisotropie.*

L'évolution du rapport d'ovalisation au cours de la déformation est représentée Figure VI.16. L'analyse des courbes obtenues montre que la méthode 2A est très sensible au nombre de remaillages. Dans le cas où l'on considère 5 remaillages, la courbe pour la stratégie 2A a la bonne tendance. Lorsque le nombre de remaillages augmente (20 remaillages), la courbe décroche à 18% de compression, après 5 remaillages. Nous avons refait cette simulation avec le couplage faible et 128 particules (128 textures distribuées dans le maillage) et avons obtenu à nouveau la bonne tendance, ce qui montre que la stratégie 2A nécessite d'autant plus de particules que le nombre d'opérations de remaillages augmente.
La stratégie 2B donne de bons résultats quelque soit le nombre de remaillages. Cette méthode est donc moins sensible au paramètre nombre de remaillages, ceci est lié au fait que la texture d'une cellule reste inchangée lors d'un remaillage.

Examinons maintenant l'évolution du rapport d'anisotropie à différentes hauteurs pour le taux de compression final de 60% (Figure VI.17). Les différences maximales sont de :

- 4.75% pour la simulation avec la méthode 2A et 5 remaillages obtenue pour h=30,
- 5.94% pour la simulation avec la méthode 2B et 5 remaillages obtenue pour h=30,
- 55.7% pour la simulation avec la méthode 2A et 20 remaillages pour h=35,
- 7.02% pour la simulation avec la méthode 2B et 20 remaillages pour h=30.

Dans le cas de la simulation avec la méthode 2A et 20 remaillages, l'erreur fluctue entre 52 et 55.7%. Nous obtenons donc les mêmes conclusions que celles obtenues lors de l'analyse de la Figure VI.16.

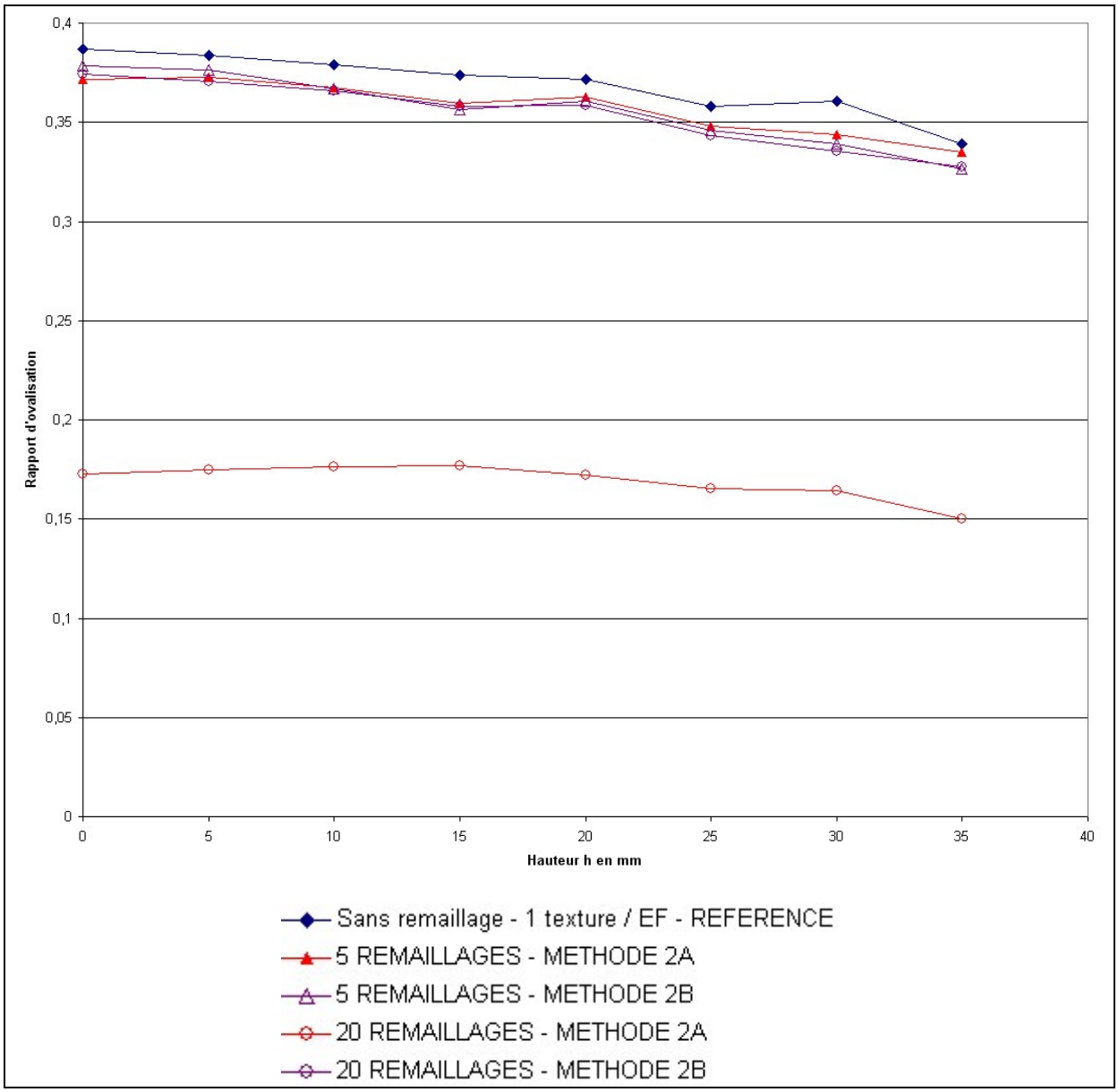


Figure VI.17 *Evolution du rapport d'ovalisation à différentes hauteurs h pour le taux de compression finale de 60% en fonction du nombre de remaillages.*

Etudions l'évolution de la texture cristallographique sur les différentes zones, pour les simulations avec 20 remaillages (Figure VI.18 et VI.19).
Dans le cas de la méthode 2A (Figure VI.18), la texture est quasiment identique pour les deux zones. Elle est très différente de la texture attendue (cf. Figure VI.9). Le remaillage avec la méthode 2A ne conserve pas exactement la texture de déformation. Si l'on compare avec la Figure VI.14 (5 remaillages – méthode 2A), on voit que les figures de pôles se sont fortement dégradées.
Dans le cas de la méthode 2B (Figure VI.19), l'évolution de texture est correcte (cf. Figure VI.9). A chaque remaillage, la texture de la cellule est conservée.

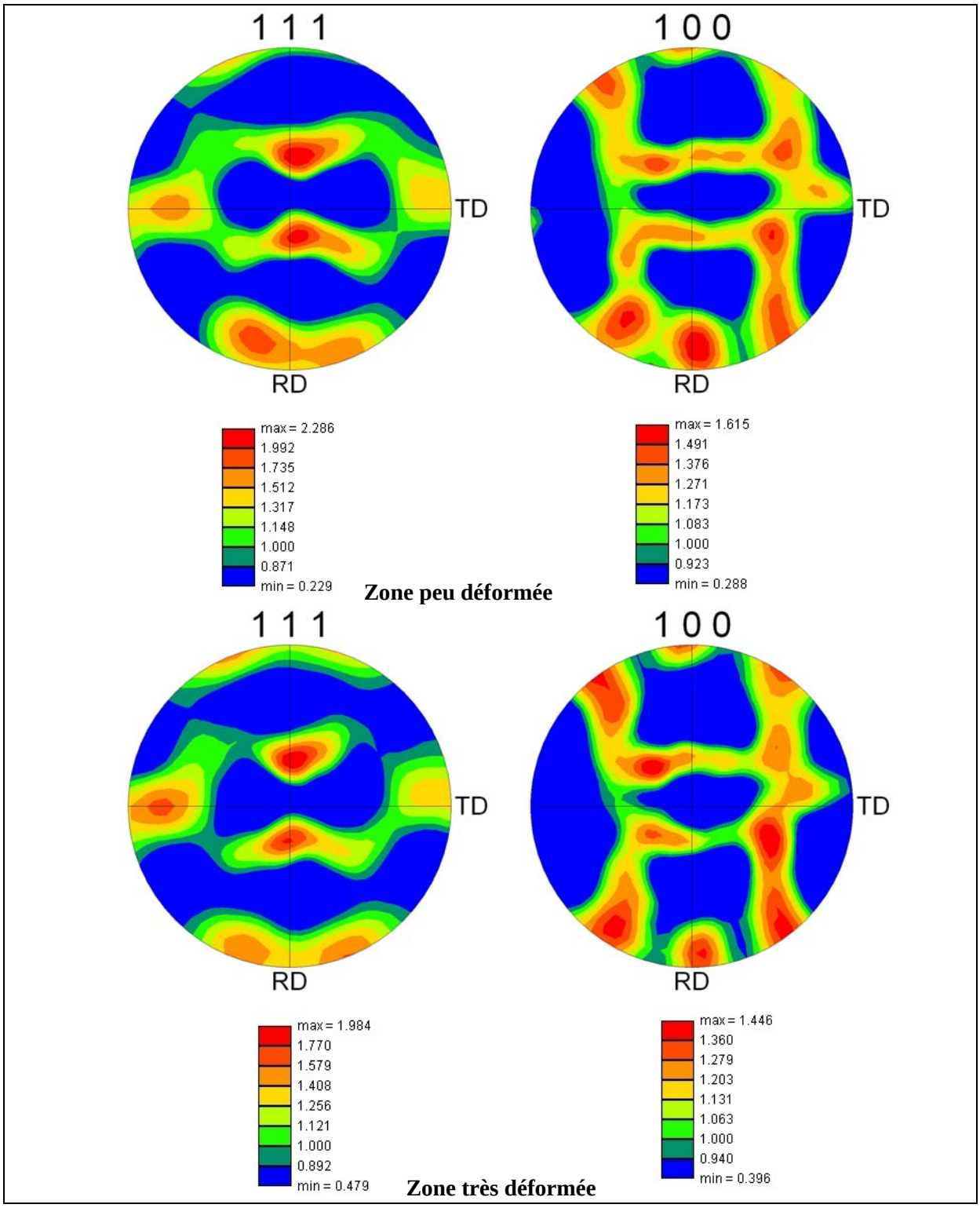


Figure VI.18 *Figures de pôle {111} et {100} dans la zone très déformée (188 EFs) et dans la zone peu déformée (50 EFs) pour le taux de compression finale de 60% et la simulation avec 20 remaillages et 48 particules METHODE 2A. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

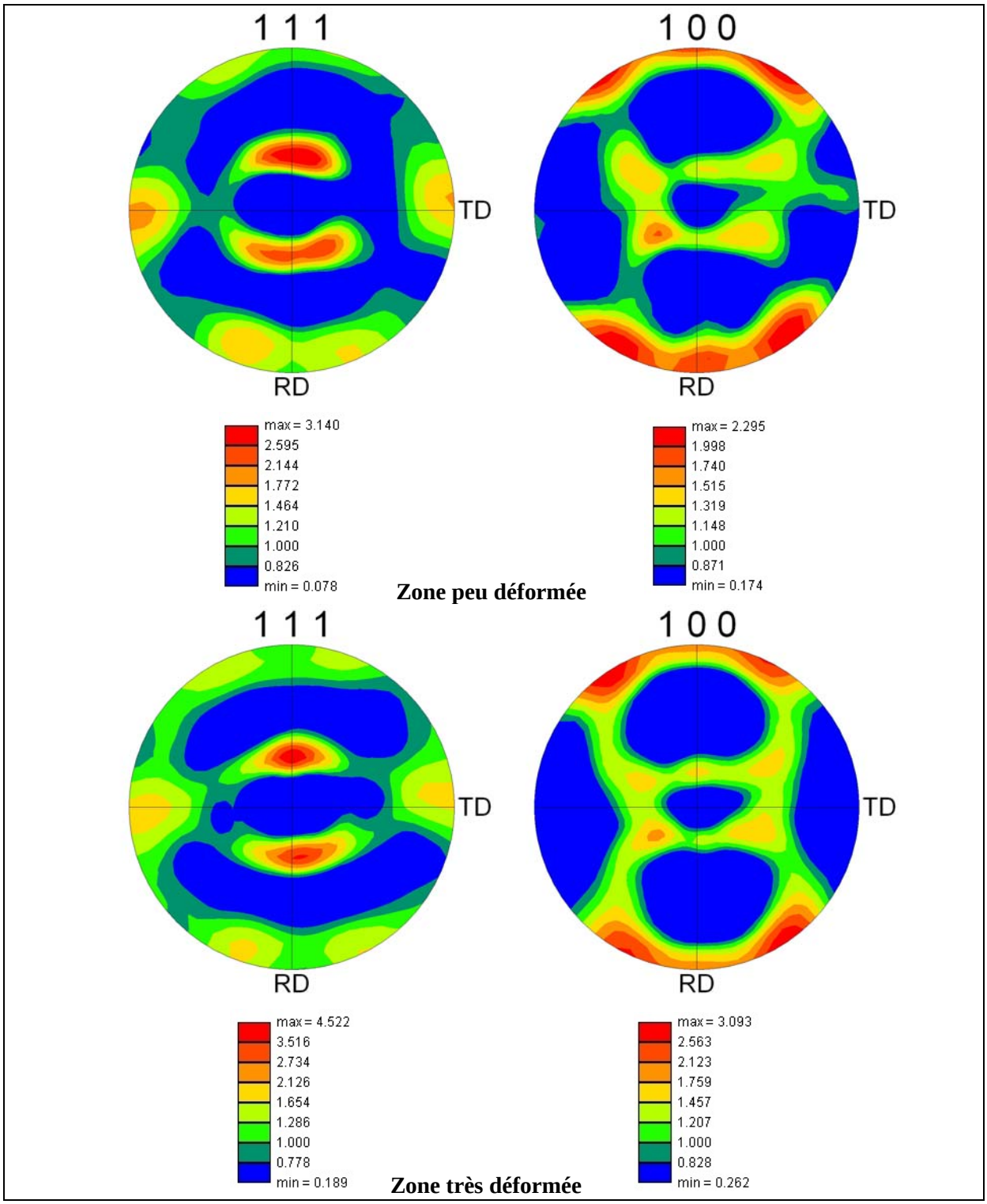


Figure VI.19 *Figures de pôle {111} et {100} dans la zone très déformée (214 EFs) et dans la zone peu déformée (117 EFs) pour le taux de compression finale de 60% et la simulation avec 20 remaillages et 48 particules METHODE 2B. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

VI.3.3 Temps de calcul des simulations

Les temps de calcul des différentes simulations sont représentés Tableau VI.1. La méthode 2A requiert des temps de calcul similaires à la méthode 2B. En effet, comme la loi de comportement varie un peu d'une simulation à l'autre, le nombre d'EFs dans le maillage n'est lui non plus pas identique. Nous ne considérons pas le cas méthode 2A pour 20 remaillages qui induit des mauvais résultats. Nous retiendrons qu'augmenter le nombre de remaillages n'augmente pas le temps de calcul des simulations, c'est même le contraire, la convergence de la résolution mécanique étant améliorée après remaillage grâce à une meilleure qualité d'élément.

	1 particule 5 remaillages	27 particules 5 remaillages	48 particules 5 remaillages	48 particules 20 remaillages
Méthode 2A	9h45min	6h16min	7h10min	5h3min
Méthode 2B	9h41min	6h41min	9h2min	8h6min

Tableau VI.1 *Temps CPU des simulations selon la stratégie de transport utilisée avec un Pentium IV 1.8 GHz.*

VI.3.4 Discussion et choix de la méthode de transport des variables de modèles polycristallins lors du remaillage

Pour les deux stratégies de transport des variables polycristallines étudiées, il est nécessaire de considérer un nombre suffisant de particules dans le maillage lorsque la déformation sur l'ensemble de la pièce est hétérogène. Les variables polycristallines évoluant différemment selon la déformation imposée, attribuer une texture correspondant à des zones très déformées dans des zones qui le sont moins modifie l'anisotropie mécanique induite par l'évolution de ces variables polycristallines. Positionner davantage de particules dans le maillage diminue la taille des cellules, qui constituent alors des zones plus homogènes. Le transport des variables polycristallines par l'intermédiaire des particules est alors plus précis.

Lors du remaillage, le maillage est modifié et les textures partielles ne peuvent donc pas être transportées. Du fait de l'hétérogénéité de déformation dans la cellule, la nécessaire redistribution d'orientations ne permet pas de satisfaire l'hypothèse de Taylor.
La méthode 2A permet de se rapprocher au mieux de l'hypothèse de Taylor pour l'ensemble des cristaux d'une cellule, au détriment de la conservation des orientations lors du remaillage. La méthode 2B conserve les orientations au remaillage.

Au vu des simulations réalisées, il apparaît que la conservation de la texture prime sur la validité relative de l'hypothèse de Taylor sur une cellule. La méthode la plus appropriée pour le transport des variables polycristallines sera donc la méthode 2B. Sa robustesse vis-à-vis de la fréquence de remaillage est nécessaire du fait qu'au cours des simulations des procédés de mise en forme, le remaillage n'est pas une variable que l'on peut réellement contrôler. La méthode utilisée pour le transport des variables polycristallines ne doit donc pas être trop sensible à ce facteur.

VI.4 Compléments concernant l'étude de la méthode 2B

Nous complétons ici l'étude de la méthode 2B. Deux analyses restent encore à mener : l'influence de la taille de maille ainsi que l'influence du couplage utilisé sur la prédiction d'anisotropie mécanique.

VI.4.1 Sensibilité à la taille de maille

Lors de simulations de procédés de mise en forme utilisant un remaillage adaptatif, la taille de maille peut évoluer localement, et le nombre d'EFs dans le maillage augmenter. Pour limiter les erreurs d'arrondi liées à la méthode de distribution selon le volume (cf. chapitre V section V.5.1.2 et chapitre III section III.2.3), il peut être nécessaire de réévaluer le nombre de textures à distribuer dans le maillage. Nous proposons ici une brève étude liée à cette problématique.

Dans le cas des simulations précédentes, la taille de maille restant identique à la taille de maille initiale au cours du remaillage, le nombre d'EFs dans le maillage varie très peu. De ce fait, nous avons considéré que le nombre de textures dans chaque cellule, déterminé par la méthode de distribution selon le volume, restait égal à celui calculé pour la configuration initiale.

Nous avons dans la présente étude prescrit lors du remaillage une taille de maille égale à 8mm, plus petite que la taille de maille initiale (égale à 12mm). Le nombre d'EFs dans le maillage évolue donc principalement lors du premier remaillage. Nous effectuons 3 remaillages au cours de la simulation soit un remaillage tous les 12% de déformation, le taux de compression final étant cette fois-ci de 45% (au lieu de 60%). Nous comparons deux types de simulations.

Dans une première simulation, le nombre de textures dans chaque cellule est maintenu constant au cours de la simulation (méthode 2Ba). Lorsque le nombre d'EFs augmente, l'erreur d'arrondi commise sur la méthode de distribution selon le volume augmente.

Dans la deuxième simulation, considérant comme constant le volume des particules au cours de la déformation, nous avons procédé de la manière suivante pour évaluer le nombre de textures à distribuer (méthode 2Bb) :

- Nous avons imposé un nombre moyen d'orientations par EF égal à 50 pour chaque cellule.
- Nous avons identifié la particule qui contenait le plus d'EFs, et relevé dans celle-là le nombre moyen d'orientations par EF. Si ce nombre était supérieur à 50, les variables polycristallines de la cellule restaient inchangées mais dans le cas où ce nombre était inférieur à 50, les variables polycristallines étaient dupliquées jusqu'à ce que le nombre moyen d'orientations obtenu dans cette cellule soit supérieur à 50.
- Une fois calculé le facteur de duplication des variables polycristallines dans cette cellule, les variables polycristallines des autres cellules était multipliées par ce même facteur.

Cette méthode permet de conserver de petites erreurs d'arrondi dans la méthode de distribution. Néanmoins, cette méthode tend à augmenter le temps de calcul puisqu'elle augmente le nombre d'orientations considérées dans le maillage global.

Les résultats obtenus en terme d'évolution du rapport d'anisotropie au cours de la déformation sont présentés Figure VI.20. Nous voyons que quelle que soit la taille de maille et la méthode considérée les courbes suivent la même tendance. Néanmoins, l'utilisation de la méthode 2Bb permet de réduire l'écart entre la simulation de référence et les simulations avec remaillage, en conservant suffisamment petites les erreurs d'arrondi de la méthode de distribution .

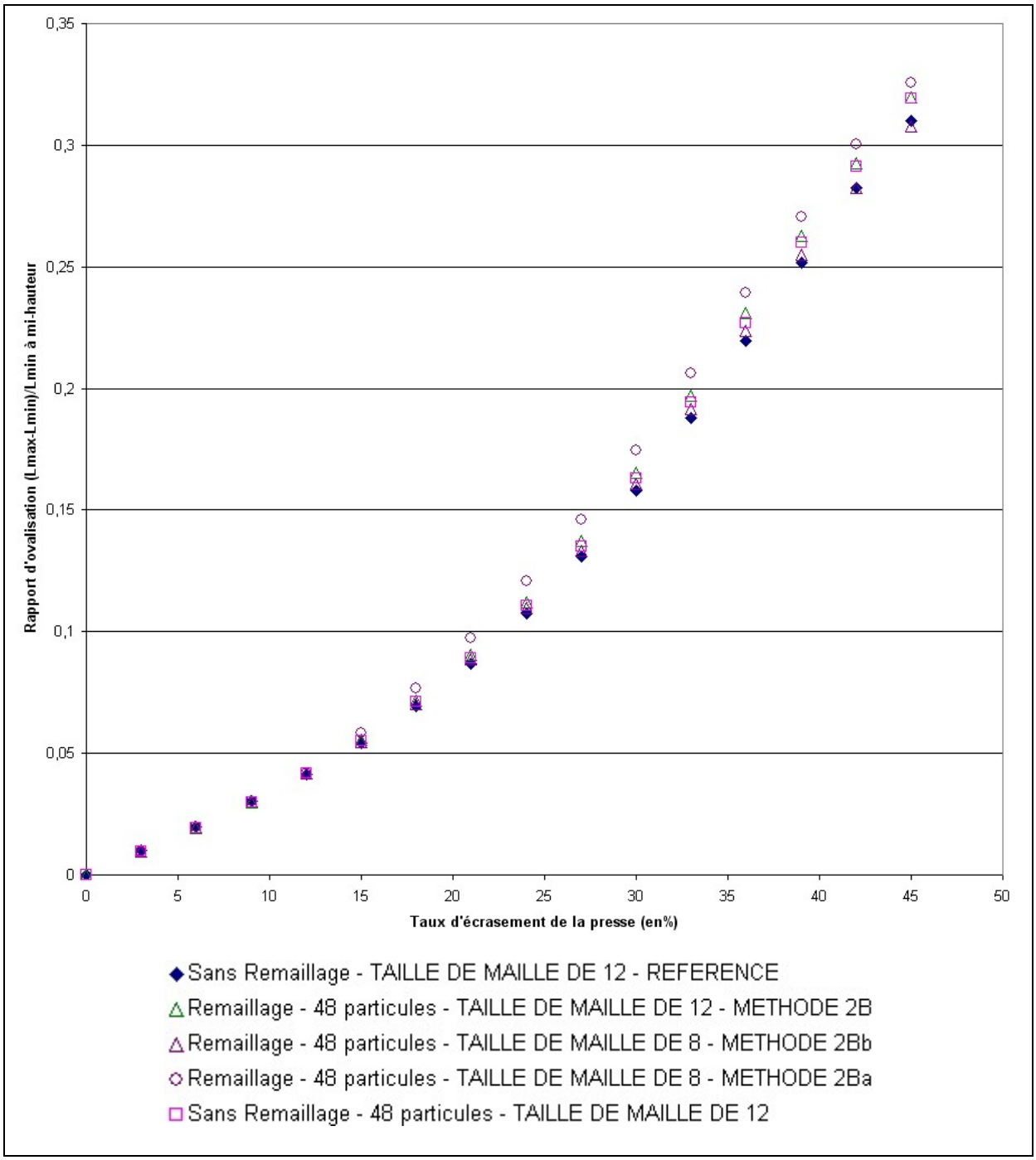


Figure VI.20 *Influence de la taille de maille sur la prédiction d'anisotropie*

Les temps de calcul (temps CPU avec un Pentium IV 1.8 GHz) des simulations obtenus sont de 5h26min pour la simulation avec la méthode 2Ba et 19h24min pour la simulation avec la méthode 2Bb. Augmenter avec cette méthode le nombre de variables polycristallines au cours de la simulation génère des temps de calcul très élevés.

Au vu de ces résultats, on peut remettre en question la nécessité d'imposer un nombre moyen d'orientations par EF égal à 50 et la nécessité de dupliquer le nombre de textures dans le maillage. La réponse dépend de la précision désirée sur la prédiction d'anisotropie. Au lieu de fixer a priori un nombre moyen d'orientations de 50 par EF, on peut envisager d'implémenter dans le code un critère qui utiliserait l'écart-type des erreurs commises dans la méthode de distribution. Ce critère permettrait

à l'utilisateur de contrôler la précision sur la prédiction d'anisotropie qu'il désire, une grande précision nécessitant un temps de calcul élevé.
Une autre manière de diminuer le temps de calcul est d'utiliser le couplage faible, discuté ci-dessous.

VI.4.2 Sensibilité au couplage rhéologique considéré

Nous allons maintenant évaluer l'influence du couplage rhéologique utilisé sur la prédiction d'anisotropie mécanique. La simulation choisie pour la comparaison entre les 2 types de couplage est la simulation avec 48 particules dans le maillage EF et 20 remaillages (taille de maille fixe égale à la taille de maille initiale). Nous comparons les résultats obtenus pour la simulation en couplage faible et en couplage fort pour la méthode 2B.

Les courbes représentées Figure VI.21 correspondant à l'évolution du rapport d'anisotropie à *H=0* en fonction de la déformation ont toutes la même tendance. La simulation avec couplage faible s'écarte un peu plus de la simulation de référence que celle en couplage fort.

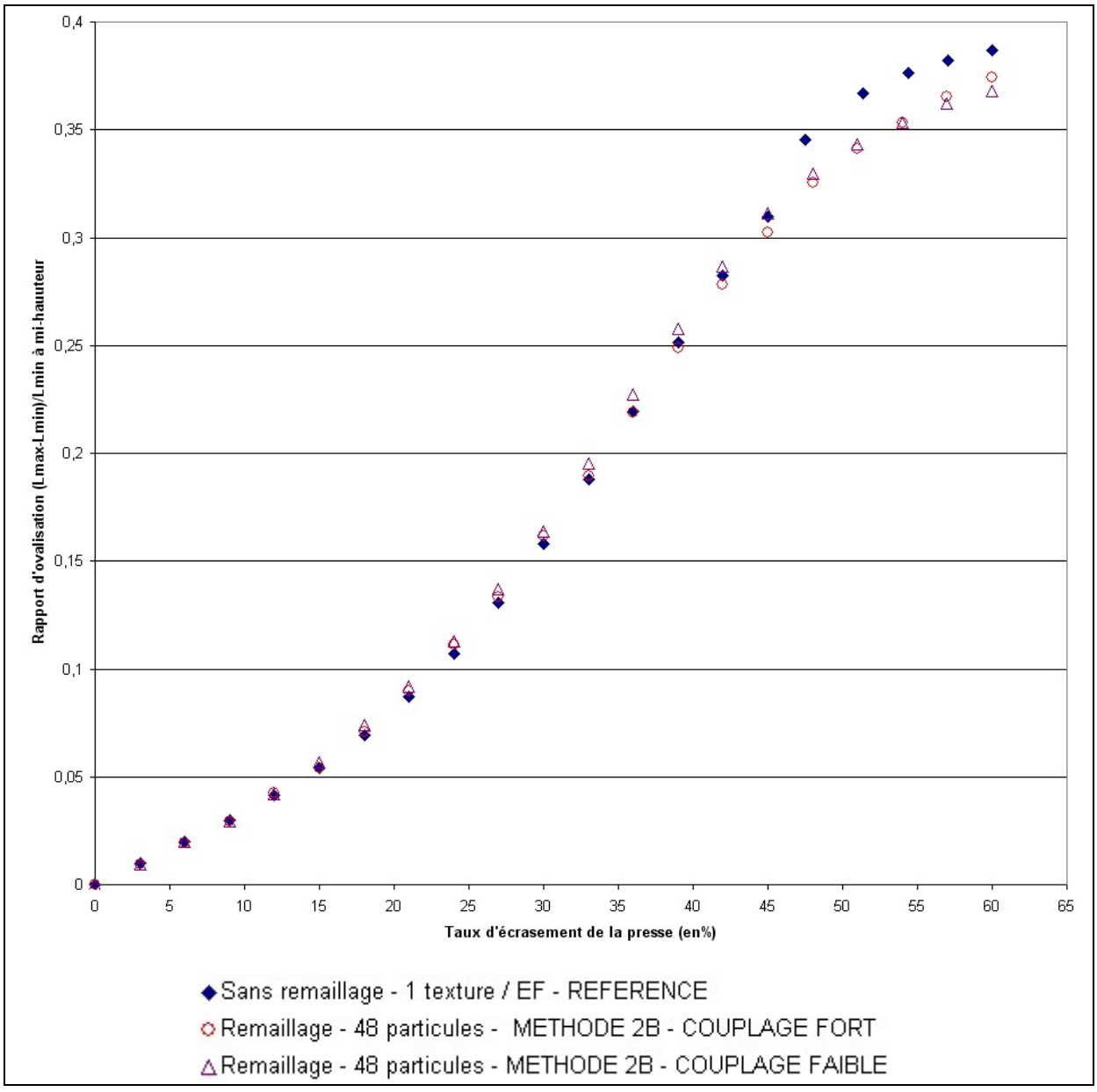


Figure VI.21 *Influence de la stratégie de couplage sur la prédiction d'anisotropie.*

Pour chiffrer cet écart, nous avons étudié l'évolution du rapport d'ovalisation pour la déformation finale selon différentes hauteurs (Figure VI.22). Nous remarquons que la forme globale de la courbe obtenue pour le couplage faible est semblable à celle du couplage fort. Nous obtenons une différence maximale de 7.675% pour la simulation avec couplage faible (pour h=30) alors que nous obtenions une différence maximale de 7.02% pour la simulation avec couplage fort (pour h=30). La différence entre les deux types de couplage est donc très faible, voire négligeable.

L'évolution de la texture cristallographique en couplage faible représentée Figure VI.23 est très semblable à celle obtenue dans le cas de la stratégie de couplage fort Figure VI.19.

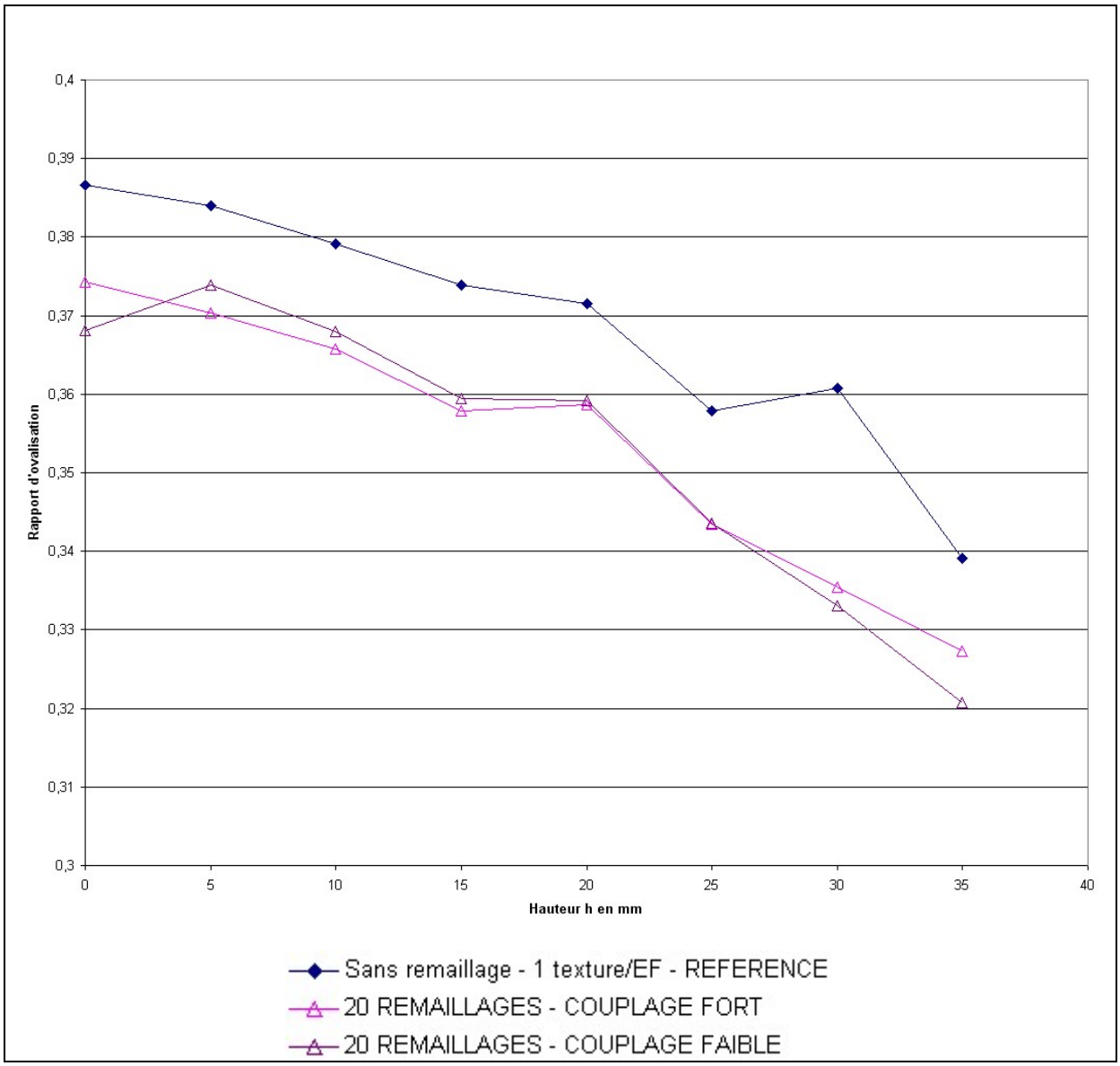


Figure VI.22 *Evolution du rapport d'ovalisation à différentes hauteurs h pour le taux de compression finale de 60% en fonction de la stratégie de couplage utilisée. Comparaison de la simulation de référence avec les simulations avec remaillage utilisant la méthode 2B.*

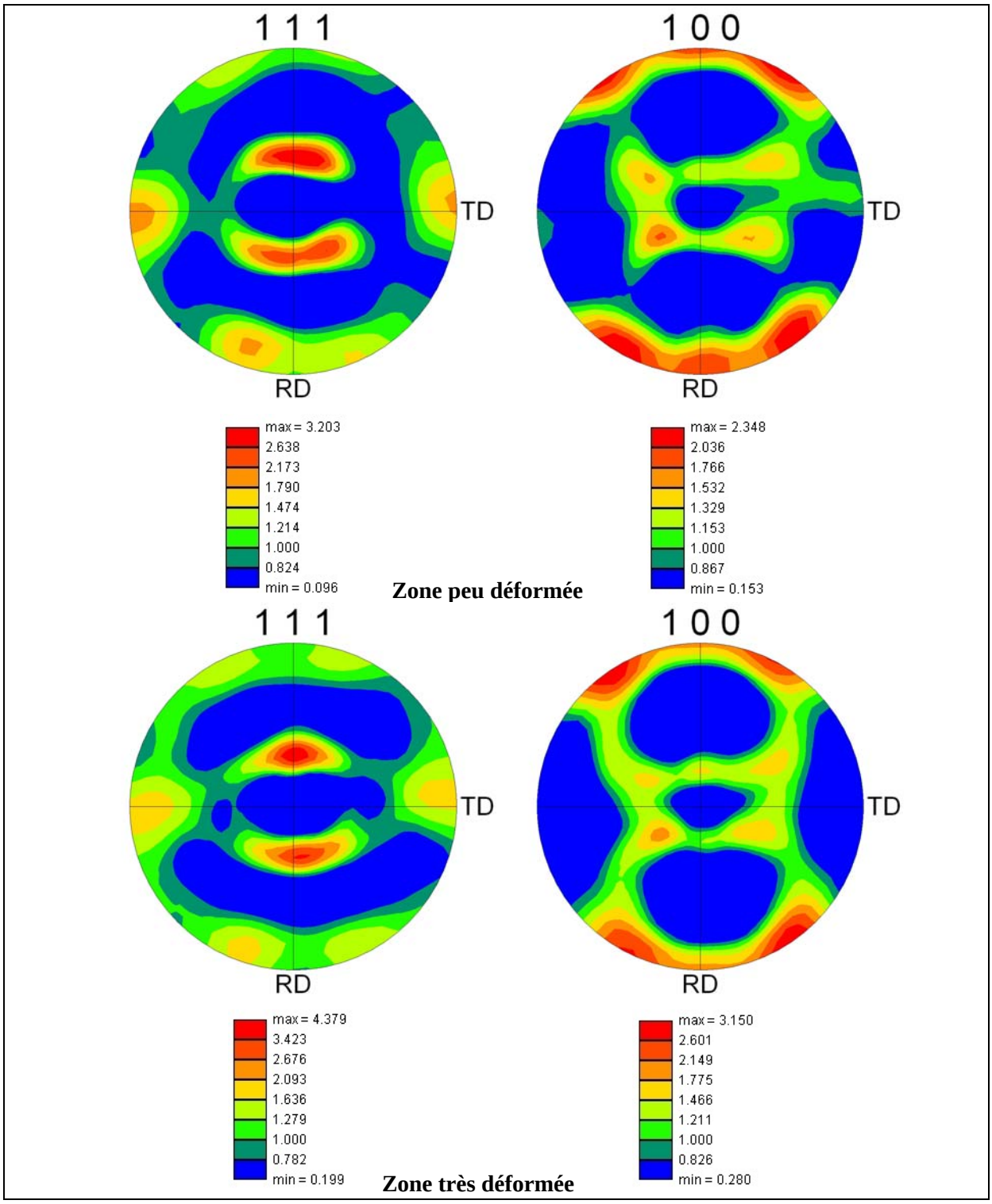


Figure VI.23 *Figures de pôle {111} et {100} dans la zone très déformée (232 EFs) et dans la zone peu déformée (116 EFs) pour le taux de compression finale de 60% et la simulation avec 20 remaillages et 48 particules METHODE 2B – COUPLAGE FAIBLE. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

Le temps de calcul des simulations est reporté Tableau VI.2. L'utilisation du couplage faible au lieu du couplage fort permet de réduire sensiblement le temps de calcul des simulations, le facteur de réduction étant de 4.6.

	COUPLAGE FORT	COUPLAGE FAIBLE
Temps CPU	8h6min	1h44min

Tableau VI.2 *Temps CPU des simulations avec 48 particules/66 textures et 20 remaillages avec un Pentium IV 1.8GHz. Comparaison des simulations avec couplage faible et couplage fort. Méthode 2B.*

Le couplage faible, au prix d'une faible augmentation de l'erreur sur la prédiction d'anisotropie, diminue sensiblement le temps de calcul.

Conclusion

Nous avons mis en place une méthode efficace de transport des variables polycristallines lors du remaillage utilisant le concept des particules Lagrangiennes. Nous avons vu que lors des simulations avec remaillage, il est nécessaire de positionner un nombre suffisant de particules Lagrangiennes dans le maillage, dans la mesure où cela permet de localiser dans les cellules, à des dimensions réduites par rapport au maillage global, les informations relatives aux textures et à leurs évolutions. Pour que la méthode de transport donne de bons résultats en terme de prédiction d'évolution de texture et d'anisotropie, il est nécessaire, quel que soit le nombre de remaillages, que les cellules délimitent des zones quasi-homogènes en déformation.

Références bibliographiques

[BOUS 2005] R. Bousseta, Simulation d'erreur et remaillage adaptatif : application à la simulation 3D des procédés de mise en forme des matériaux, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 2005.

[COU 1991] T. Coupez, Grandes déformations et remaillage automatique, Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris – CEMEF, 1991.

Chapitre VII

Etude expérimentale

Sommaire

VII.1 Caractérisation de la microstructure des matériaux d'étude ……... 149
VII.1.1 Les techniques expérimentales …… 149
VII.1.1.1 La microscopie optique et l'analyse d'images ……... 149
VII.1.1.2 La technique EBSD …… 150
VII.1.1.3 La technique EDS …….. 150
VII.1.1.4 La microdureté Vickers ……. 150
VII.1.2 Caractérisation microstructurales des différents matériaux …… 150
VII.1.2.1 L'URB66 corroyé ……... 151
VII.1.2.2 L'URB66 brut de solidification ……. 151
VII.1.2.3 L'AA7175 filé …… 156
VII.2 Essais mécaniques ……. 157
VII.2.1 Présentation des essais …… 157
VII.2.1.1 L'URB66 corroyé ……... 157
VII.2.1.2 L'URB66 brut de solidification ……. 159
VII.2.1.3 L'AA7175 filé …… 166
VII.2.2 Analyse de l'anisotropie mécanique et de l'évolution de texture après déformation ……. 167
VII.3.1 L'URB66 corroyé …….. 167
VII.3.2 L'URB66 brut de solidification …… 168
VII.3.3 L'AA7175 filé …….. 171
Conclusion …… 174
Références bibliographiques ……... 175

Dans ce chapitre, nous décrivons les différents travaux expérimentaux que nous avons réalisés. Dans un premier temps, nous allons présenter d'un point de vue microstructural les 3 matériaux de notre étude, l'Uranus B66 (URB66) brut de solidification, l'Uranus B66 (URB66) corroyé ainsi que l'Aluminium AA7175 filé. Nous présentons ensuite les essais mécaniques effectués puis nous analysons l'anisotropie mécanique et l'évolution de la texture cristallographique après déformation.

Le but de ces travaux est multiple :

- analyser les différents phénomènes microstructuraux pouvant influencer l'anisotropie, principalement dans le cas de la structure brute de solidification,
- analyser comment se traduit cette anisotropie d'un point de vue de l'écoulement micro et macroscopique à travers la forme des éprouvettes et au niveau de la réponse mécanique en termes de courbes contrainte-déformation,
- avoir des données expérimentales pour valider les modèles numériques de comportement anisotrope développés dans Forge3®, qui ont été détaillés au chapitre précédent.

VII.1 Caractérisation de la microstructure des matériaux d'étude

Avant de présenter les caractéristiques microstructurales des matériaux d'étude, nous exposons rapidement les différentes techniques expérimentales que nous avons utilisées pour notre étude.

VII.1.1 Les techniques expérimentales

Pour l'étude des caractéristiques microstructurales des matériaux, nous avons utilisé les techniques expérimentales suivantes :

- la microscopie optique et l'analyse d'images, afin de connaître la taille et la forme des grains,
- la technique EBSD, afin de déterminer la texture cristallographique locale,
- la technique EDS, afin d'étudier la « texture » chimique, c'est-à-dire la variation spatiale de la composition chimique dans le matériau,
- la microdureté Vickers.

VII.1.1.1 La microscopie optique et l'analyse d'images [JAC 2000], [JAC 2001]

Nous utilisons la microscopie optique et l'analyse d'images pour connaître la taille et la forme des grains.

La microscopie optique nous permet à partir d'échantillons attaqués chimiquement de faire des micrographies des structures granulaires. Ensuite, on calque sur les micrographies les contours des grains, l'ensemble des calques donnant une population représentative (au moins 200 grains).

Enfin, nous utilisons l'analyse d'images pour traiter les calques et calculer la taille moyenne des grains. La mesure de la taille de grain se fait à partir de leur surface en supposant une certaine forme :

$$D=\sqrt{\lambda S} \qquad \text{(VII.1)}$$

où D représente la taille de grain, S la surface du grain et λ un facteur de forme.
Des exemples de calcul de la taille de grains moyenne sont donnés dans le Tableau VII.1 selon différentes formes de grain. Nous avons aussi identifié le facteur de forme de Féret de chaque grain qui correspond à :

$$F = \frac{L}{l} \qquad \text{(VII.2)}$$

où L est la plus grande longueur et l la plus petite longueur perpendiculaire à la précédente.

Forme du grain	Calcul de la surface S d'un grain	Taille de grain D	Facteur de forme λ
Disque	$\pi D^2/4$	$\sqrt{(4S/\pi)}$	$4/\pi$
Carré	D^2	$\sqrt{S}$	1
Ellipse (demi-axes $a>b$)	πab	$\sqrt{(4Sa/\pi b)}$	$4a/\pi b$

Tableau VII.1 *Exemple de mesures de la taille de grains en fonction de différentes formes de grain considérées.*

VII.1.1.2 La technique EBSD

La technique de diffraction d'électrons rétrodiffusés (Electron Back Scattered Diffraction ou EBSD) couplée à un Microscope Electronique à Balayage (MEB) permet d'obtenir des informations de nature cristallographique sur des matériaux monocristallins ou polycristallins. En chaque point de l'échantillon balayé par le faisceau d'électrons se produit le phénomène de rétrodiffusion des électrons. Certains électrons rétrodiffusés sont diffractés dans des directions particulières de l'espace : on obtient sur un écran de phosphore un diagramme de diffraction constitué de pseudo-bandes de Kikuchi. Le cliché est numérisé puis indexé automatiquement à l'aide d'un logiciel : l'orientation cristallographique du cristal au point de mesure est déterminée.

Afin que les lignes de Kikuchi soient bien visibles, l'échantillon doit idéalement être poli électrolytiquement pour supprimer l'écrouissage superficiel induit par le polissage mécanique.

VII.1.1.3 La technique EDS [REP 2003]

Nous utilisons l'analyse EDS (Energy Dispersive Spectroscopy). Les électrons des atomes de l'échantillon sont excités par le faisceau du MEB et se désexcitent en émettant des rayons X d'énergie caractéristique des atomes mis en jeu. La mesure du spectre de ces énergies permet de déterminer la nature du matériau.

VII.1.1.4 La microdureté Vickers [HAU 1989]

Nous utilisons un appareil appelé microduromètre qui constitue un accessoire du microscope métallographique. Nous appliquons une charge sur le pénétrateur en diamant qui a la forme d'une pyramide de base carrée et d'angle au sommet 136°. Le pénétrateur produit une empreinte pyramidale. La diagonale *d* de l'empreinte est mesurée à l'aide du microscope. A l'aide de la mesure des diagonales, on accède au coefficient de microdureté Vickers, noté *Hv*. La dureté Vickers *Hv*, représentant une pression d'indentation moyenne, donne des mesures corrélées à la limite d'élasticité du matériau suivant la relation $Hv \approx 3\sigma_e$ où σ_e désigne la limite d'élasticité.

VII.1.2 Caractéristiques microstructurales des différents matériaux

Les trois matériaux étudiés sont :

- l'URB66 (acier super-austénitique) corroyé
- l'URB66 brut de solidification, le procédé de solidification utilisée pour l'élaboration de la brame est une coulée sous pression,
- l'AA7175 filé.

La symétrie cristalline des trois matériaux d'étude est Cubique Face Centrée, puisque l'acier est austénitique.

VII.1.2.1 L'URB66 corroyé

Caractérisation des grains dans le matériau

Pour caractériser la structure granulaire de l'URB66 corroyé, nous avons utilisé une micrographie (Figure VII.1) du matériau réalisée à l'aide d'une observation en contraste électrons rétrodiffusés (Microscopie Electronique à Balayage) et mesuré une population totale de 327 grains. Les grains sont de forme équiaxe. Nous considérons une forme équivalente à celle d'un disque. L'aire moyenne d'un grain est de 1937 microns² et la taille moyenne d'environ 47 microns (cf. Tableau VII.1).

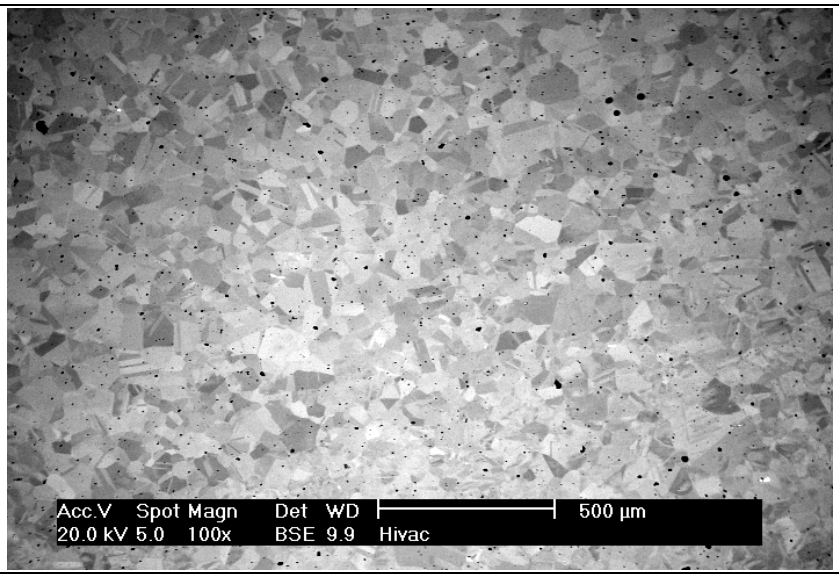


Figure VII.1 *Observation en contraste électrons rétrodiffusés de l'URB66 corroyé.*

Caractérisation de la texture cristallographique

La texture cristallographique a été caractérisée par la technique EBSD en mesurant 16 zones de 400*400 microns2 avec un pas de mesure de 10 microns afin d'avoir 4 à 5 pointés par grain en moyenne. La texture cristallographique de l'URB66 est quasiment aléatoire comme le montrent les figures de pôle {111} et {100} représentées Figure VII.2.

VII.1.2.2 L'URB66 brut de solidification

Caractérisation des grains dans le matériau : taille et forme

La macrographie de la plaque d'Uranus B66 brut de solidification (Figure VII.3) permet de définir 3 zones dans le matériau de la peau jusqu'au cœur :

- la zone de peau
- la zone colonnaire
- la zone équiaxe

où les grains n'ont ni la même forme ni la même taille, ni la même texture cristallographique. Pour les produits de coulées, les conditions de refroidissement varient avec la distance au cœur, générant l'apparition de telles zones [LES 1989]. Dans le cadre de notre étude, nous nous intéresserons aux microstructures de la zone équiaxe et de la zone colonnaire, la zone de peau étant très fine.

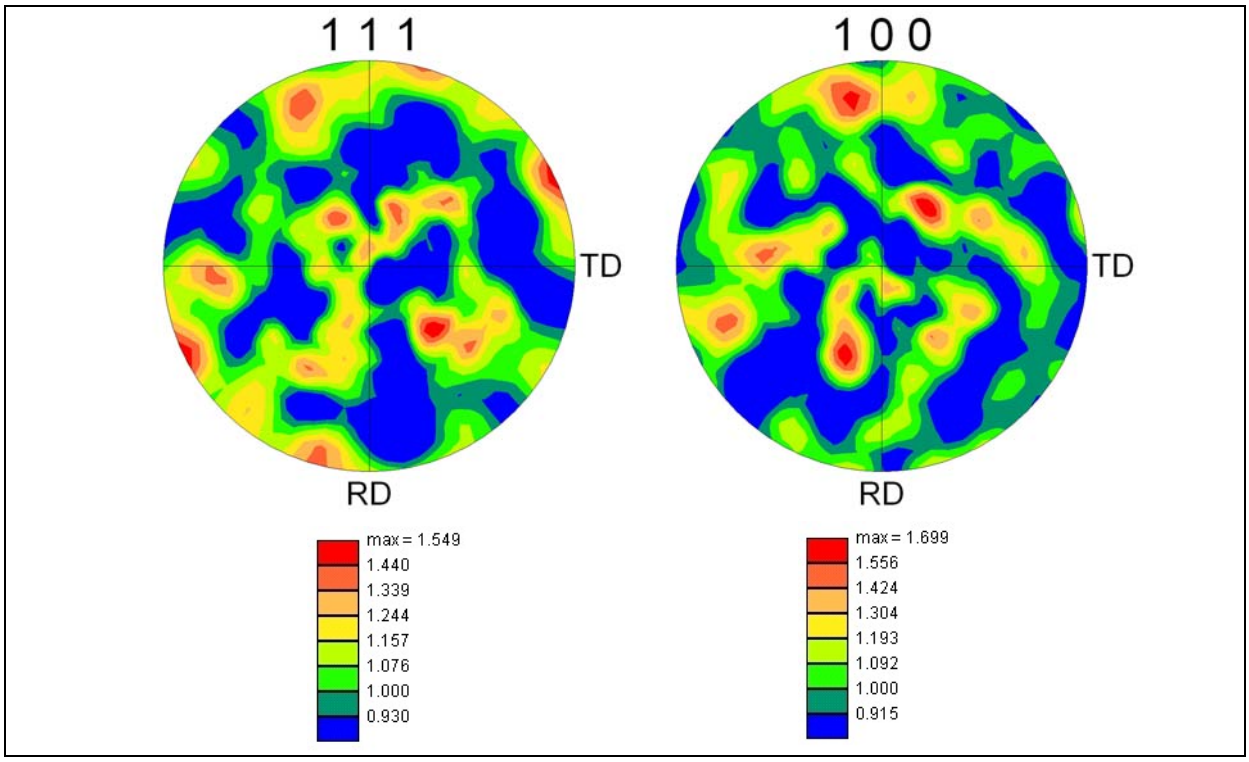


Figure VII.2 *Figures de pôle {111} et {100} de la texture initiale de l'URB66 corroyé. L'axe TD représente l'axe suivant lequel le cylindre sera comprimé.*

Nous avons déterminé à l'aide de la macrographie (Figure VII.3) la taille des grains et le facteur de forme moyen dans la zone colonnaire et dans la zone équiaxe séparément. Nous avons fait la moyenne sur 120 grains pour la zone équiaxe et 110 pour la zone colonnaire. Les résultats sont répertoriés dans le Tableau VII.2. La principale différence entre les grains se situe au niveau de la morphologie.

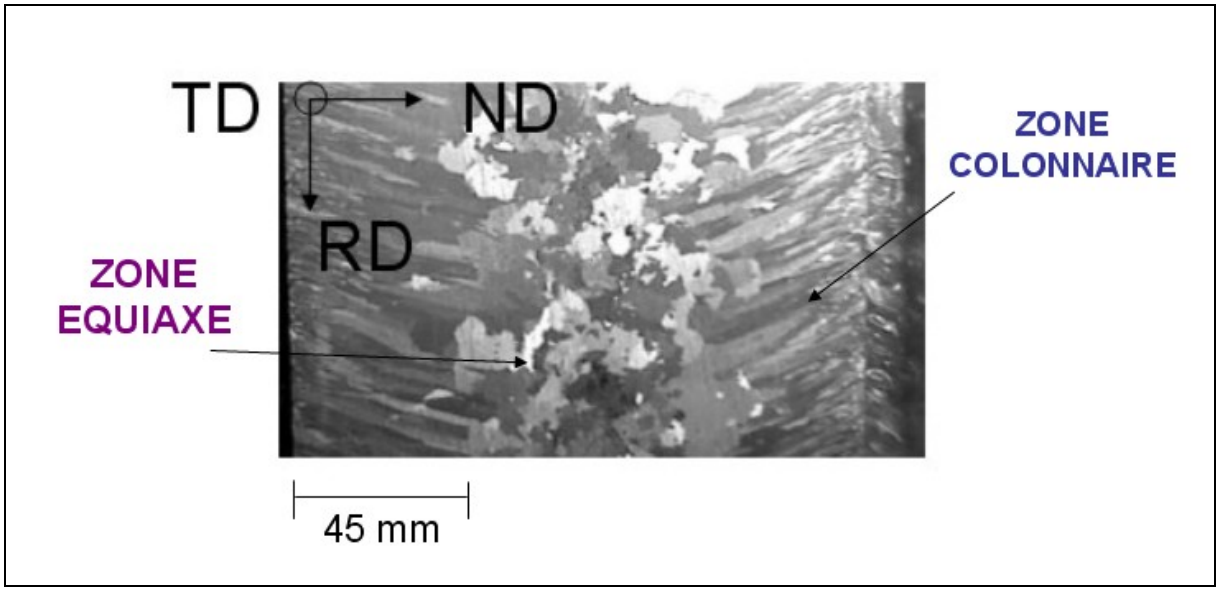


Figure VII.3 *Macrographie de la plaque d'Uranus B 66 fourni par Industeel.*

Dans la zone colonnaire, l'orientation des joints de grain est dans le sens du gradient thermique moyen au cours de la solidification, généralement perpendiculaire à la surface du produit

solidifié [WAL 1959]. Dans le cas de la plaque d'URB66 brut de solidification, les grains de la zone colonnaire ne sont pas orientés perpendiculairement à RD comme le montre la Figure VII.3 mais avec une inclinaison de 10° par rapport à ND. Ces grains sont allongés et fins comme le montre le facteur de forme de Féret qui leur est associé (cf. Tableau VII.2). Nous obtenons, en considérant que la grain a une forme parallélépipédique, des dimensions caractéristiques d'environ 9mm pour la plus grande longueur et 2mm pour la plus petite longueur.

Dans la zone équiaxe, les grains ne sont pas allongés et ont une forme quasi-sphérique (d'où le nom de la zone). La forme des grains sur une coupe est assimilée à un disque. D'après le Tableau VII.1, leur dimension caractéristique (diamètre moyen) est d'environ 4mm.

Les dimensions représentatives pour les tailles de grains que nous obtenons dans les deux zones sont du même ordre de grandeur que celles données par Pokorny dans le cas général des aciers [POK 1967]. En effet, Pokorny et al. précisent que, globalement, les tailles de grain dans la zone colonnaire varient entre 1 et 10 cm alors que dans la zone équiaxe, les tailles de grains varient entre 1 et 10 mm. Les tailles de grains obtenus dépendent des caractéristiques du matériau et du procédé de solidification et principalement de la vitesse de refroidissement.

	Grains de la zone colonnaire	Grains de la zone équiaxe
Aire moyenne d'un grain en mm2	21 +/- 10	16 +/- 5
Facteur de forme moyen de Féret	4 +/- 2	1.25 +/- 0.25

Tableau VII.2 *Résultats concernant la taille des grains et le facteur de forme de l'URB66 brut de solidification selon les différentes zones colonnaire/équiaxe.*

A l'intérieur des grains de solidification, l'URB66 brut est caractérisé par une microstructure dendritique comme représenté schématiquement Figure VII.4.

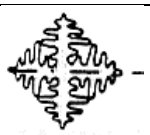
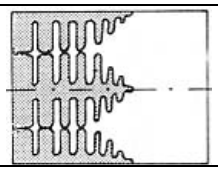
Dendrite équiaxe	Dendrite colonnaire
	

Figure VII.4 *Les différentes formes des microstructures dendritiques d'après [KUR 1989]*.

Caractérisation de la texture cristallographique

La texture cristallographique a été déterminée pour deux échantillons : un issu de la zone équiaxe et l'autre issu de la zone colonnaire.

On peut observer une macrographie (Figure VII.5) de la vue de dessus de l'état initial d'une éprouvette. Nous avons prélevé 4 échantillons cylindriques dont l'axe de révolution est perpendiculaire au sens long des grains (qui est donc l'axe ND). Ceci permet de regrouper un grand nombre de grains dans l'éprouvette pour avoir une texture de l'échantillon qui soit représentative.

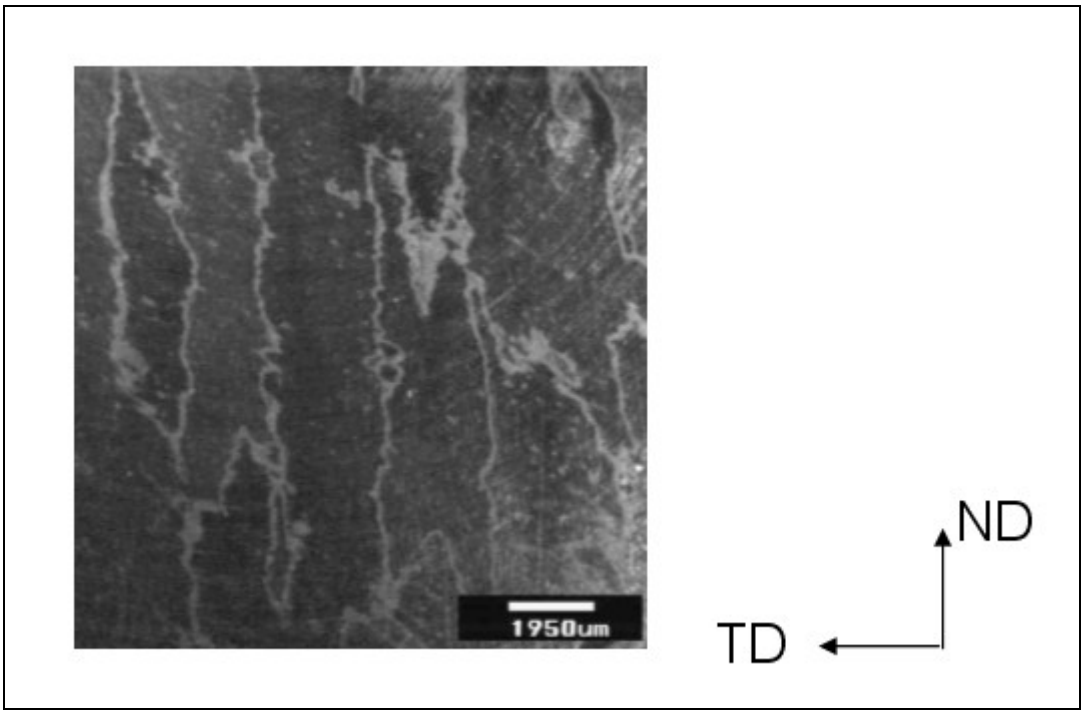


Figure VII.5 *Macrographie – Vue de dessus de l'état initial d'une éprouvette issue de la série B (cf. Figure VII.17).*

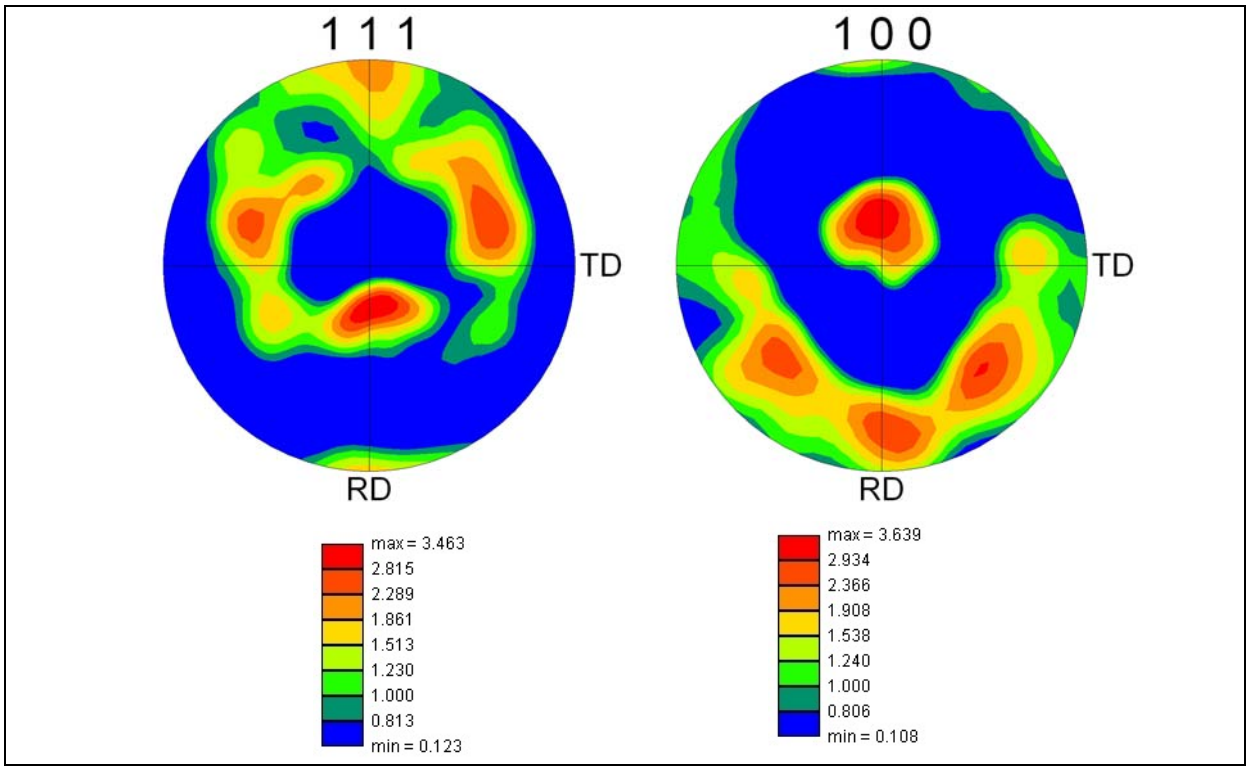


Figure VII.6 *Figures de pôle {111} et {100} obtenues expérimentalement de l'URB66 brut de solidification – Zone colonnaire avec ND sens long des grains colonnaires*

Alors que la texture cristallographique de la zone équiaxe est aléatoire, la texture de la zone colonnaire est orientée comme illustré à la Figure VII.6. Lorsque l'on étudie plus en détail la Figure de pôle {100}, on s'aperçoit que le sens long des grains est orienté selon l'axe <100>, qui correspond à la

direction de croissance des dendrites dans le cas d'une structure Cubique Face Centrée [KUR 1989]. En effet, le décalage de 10° par rapport à l'axe ND observé sur la figure de pôle {100} représentée Figure VII.6 est le même que celui observé sur la macrographie de la plaque d'URB66 (Figure VII.3).

Caractérisation de la texture chimique

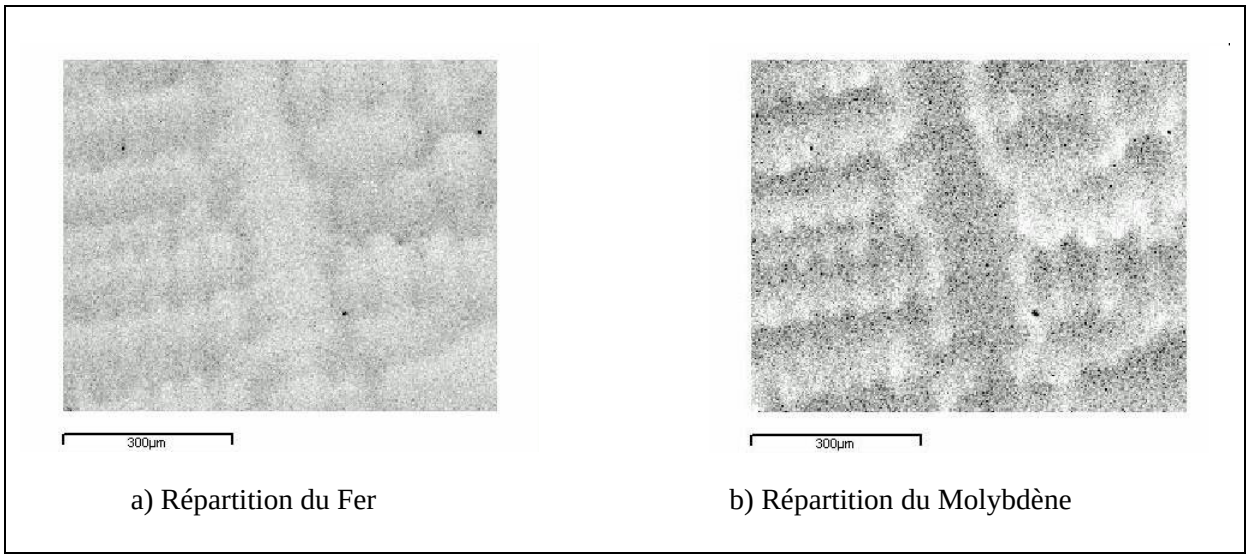
Avant de déterminer la « texture » chimique (répartition spatiale des compositions chimiques), nous avons établi la composition chimique moyenne de nos échantillons à l'aide de l'analyse EDS menée sur une zone représentée par plusieurs grains. Le résultat est reporté dans le Tableau VII.3.

Ni	Cr	Mo	W	Mn	Cu	Fe
22	24	5	2.5	3	1.5	40

Tableau VII.3 *Bilan de la composition chimique moyenne en % massique.*

La texture chimique a ensuite été étudiée pour deux échantillons d'URB66, un issu de la zone colonnaire et l'autre de la zone équiaxe. Nous avons effectué des cartes EDS au niveau des dendrites et des parties interdendritiques.
Nous obtenons dans le cas de l'échantillon colonnaire les distributions de Fer et de Molybdène données à la Figure VII.7 a) et b). Sur la Figure VII.7 a) est représentée en blanc la zone de plus haute intensité en Fer alors que sur la Figure VII.7 b) c'est la zone de plus haute intensité en Molybdène.
Nous voyons donc que la partie dendritique est enrichie en Fer et appauvrie en Molybdène alors que pour la partie interdendritique le phénomène est inversé.
Afin de quantifier plus précisément ce phénomène, qui existe aussi dans la zone équiaxe, nous avons calculé le coefficient de corrélation entre les variations relatives de Fer et celles du Molybdène. Nous trouvons un coefficient de corrélation de 0.9 dans la zone équiaxe et de 0.75 dans la zone colonnaire.
Dans la zone équiaxe, la complémentarité est plus marquée que dans la zone colonnaire, ce qui appuie le fait connu que les microségrégations y sont plus marquées.

Pour plus de détails par rapport aux microstructures de solidification, le lecteur pourra se référer à [BER 2003].



a) Répartition du Fer b) Répartition du Molybdène

Figure VII.7 *Répartition du Molybdène et du Fer au niveau des dendrites de la zone colonnaire.*

Mesures de microduretésVickers

Afin d'analyser l'impact de ces différences chimiques, nous avons réalisé des essais de microdureté sur des échantillons attaqués chimiquement. Nous avons utilisé un poids de 100g que nous avons appliqué pendant 1s. Ces essais de microdureté ont été réalisés en séparant les mesures faites sur la dendrite et la partie interdendritique, ainsi que dans un même grain ou dans un autre grain.

Le point commun entre les résultats obtenus sur plusieurs grains est que l'indice de microdureté Vickers est plus élevé pour la dendrite que pour la partie interdendritique. Il existe donc une différence de rigidité entre la dendrite et la partie interdendritique à froid. Nous devons manipuler ces résultats avec précaution car nous étudierons ensuite le comportement à chaud. Cependant, étant donné que la différence de microdureté entre la dendrite et la partie interdendritique est de l'ordre de 15% en moyenne, nous pensons qu'en terme de variation de dureté des différences peuvent subsister à chaud.

VII.1.2.3 L'AA7175 filé

Caractérisation de la texture cristallographique initiale

Comme le montre la Figure VII.8, l'AA7175 comporte beaucoup de précipités. Ces précipités perturbent l'état de surface visualisé ici après polissage électrolytique et ne permettent pas d'obtenir des spectres EBSD mesurables. Pour pouvoir mesurer la texture cristallographique de l'AA7175, nous avons effectué un traitement thermique (conditions opératoires confidentielles) afin de mettre en solution en grande partie les précipités de l'état initial sans pour autant modifier la microstructure initiale.

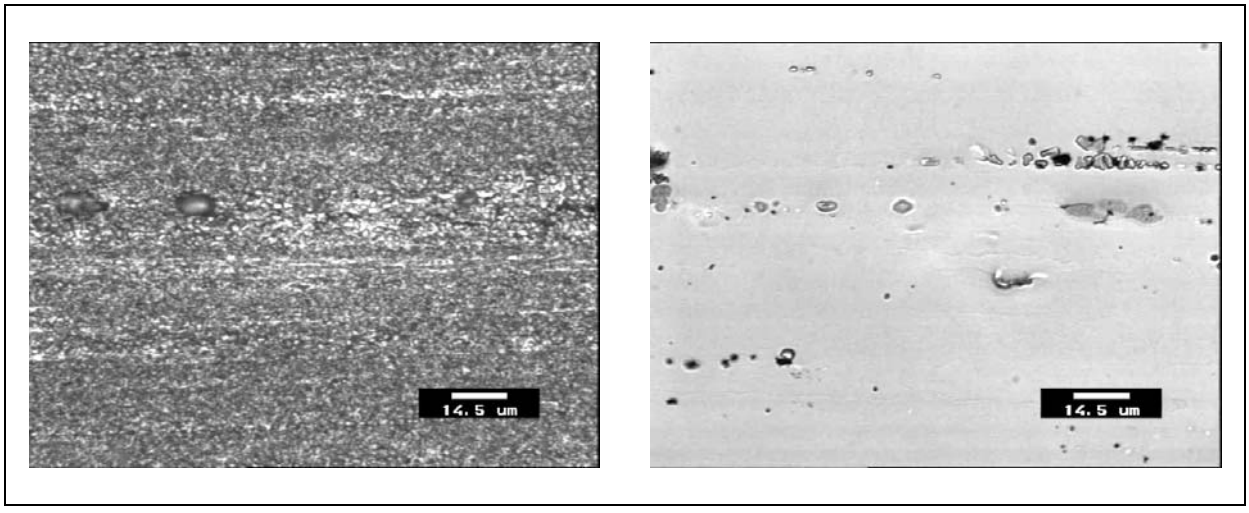


Figure VII.8 *Micrographies optique de l'AA7175 filé à l'état initial prélevé dans le sens du filage avant traitement thermique (à gauche) et après traitement thermique (à droite).*

La texture cristallographique de l'AA7175 a été caractérisée en mesurant une zone de 3300*6000 microns² avec un pas de mesure de 10 microns. La texture obtenue est représentée Figure VII.9 avec ND le sens du filage. L'AA7175 présente une texture orientée qui est caractéristique de celle obtenue par un procédé de filage. La texture cristallographique initiale présente une certaine symétrie de révolution autour de l'axe de filage, avec quelques composantes marquées superposées. La figure de pôle {100} révèle une composante cube et la figure {111} une composante parallèle à ND.

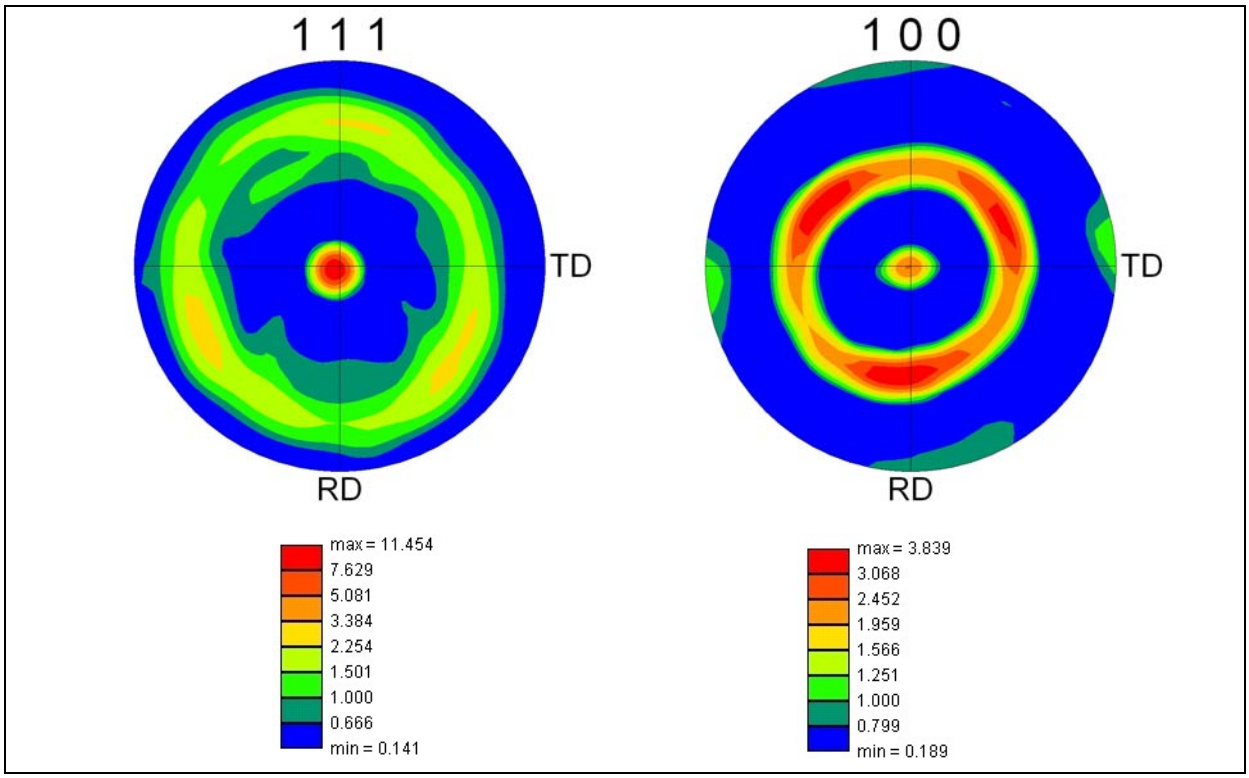


Figure VII.9 *Figures de pôle {111} et {100} de l'AA7175 filé avec ND sens du filage.*

VII.2 Essais mécaniques

VII.2.1 Présentation des essais

VII.2.1.1 L'URB66 corroyé

Les essais de compression à chaud pour l'URB66 corroyé ont été réalisés au CEMEF. Ce sont des essais de compression uniaxiale à chaud sur des éprouvettes cylindriques de 8mm de diamètre et de 12mm de hauteur. Avant compression, les éprouvettes ont été lubrifiées afin de limiter le frottement.

Les essais ont été menés sous les conditions thermo-mécaniques suivantes :

- isothermes avec un maintien en température de 10min avant la compression. Les deux températures étudiées sont : $T = 1000°C$, $T = 1150°C$.
- trois vitesses de déformation constantes : $\dot{\varepsilon}$ = 0.05, 0.5 et 1 s^{-1} (presse pilotée à vitesse de déformation moyenne constante).
- deux taux de déformation différents : ε = 0.6 et 1, soit une compression d'environ 45% et 63% de sa hauteur.

Après compression, les échantillons ont subi une trempe à l'eau afin de figer la microstructure.

L'analyse des courbes contrainte-déformation (Figure VII.10) montre une bonne reproductibilité des essais mécaniques réalisés. Pour l'essai à $1\,s^{-1}$, nous obtenons un écart plus important entre les courbes qui atteint une valeur maximale de 9% pour $\varepsilon = 0.6$. Nous remarquons Figure VII.11 les phénomènes physiques bien connus :

- lorsque la température augmente, le niveau de contrainte diminue,
- lorsque la vitesse de déformation augmente, le niveau de contrainte augmente.

Nous voyons (Figure VII.10 et Figure VII.11) pour $\dot{\varepsilon} = 0.05\,s^{-1}$ une « marche » qui se produit vers $\varepsilon = 0.28$ pour T=1150°C et vers $\varepsilon = 0.4$ pour T=1000°C. On peut supposer qu'on assiste à une localisation de déformation.

Pour l'ensemble des essais, nous avons une chute de la contrainte après un maximum, qui traduit une réorganisation de la microstructure, phénomène généralement observé à chaud.

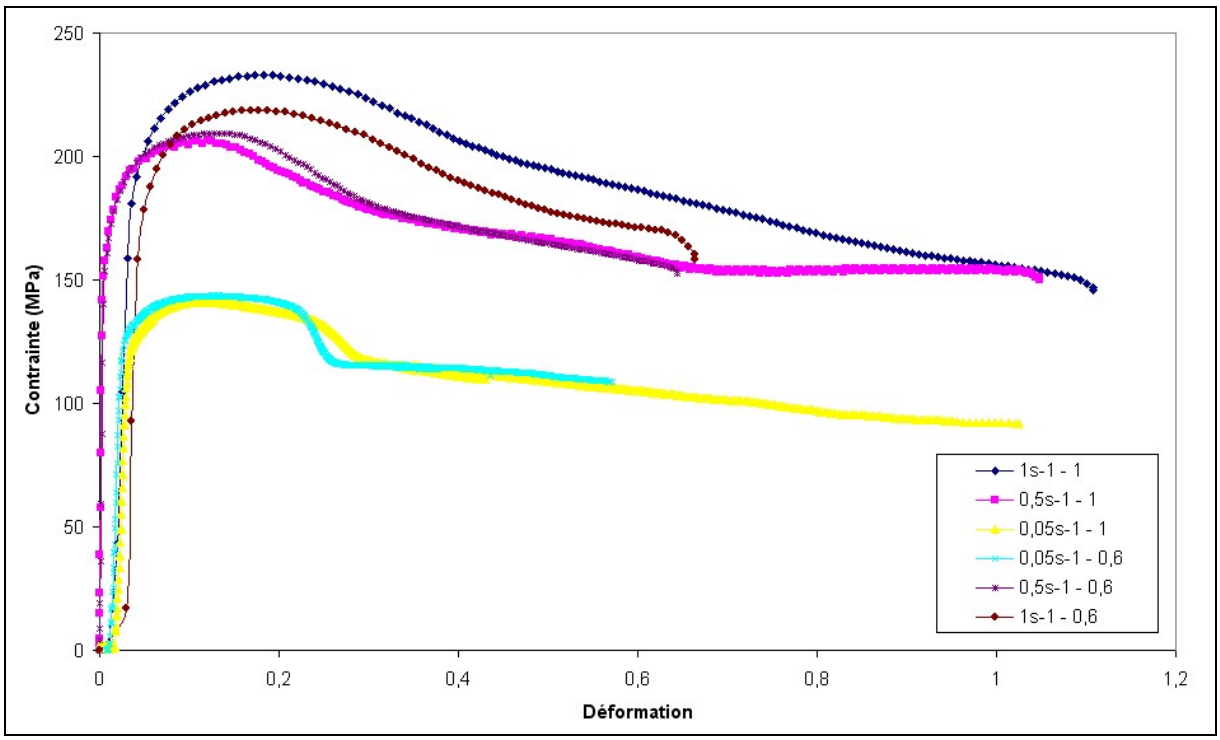


Figure VII.10 *Courbes contrainte-déformation des essais de compression sur l'URB66 corroyé à T=1150°C : illustration de la reproductibilité des essais mécaniques.*

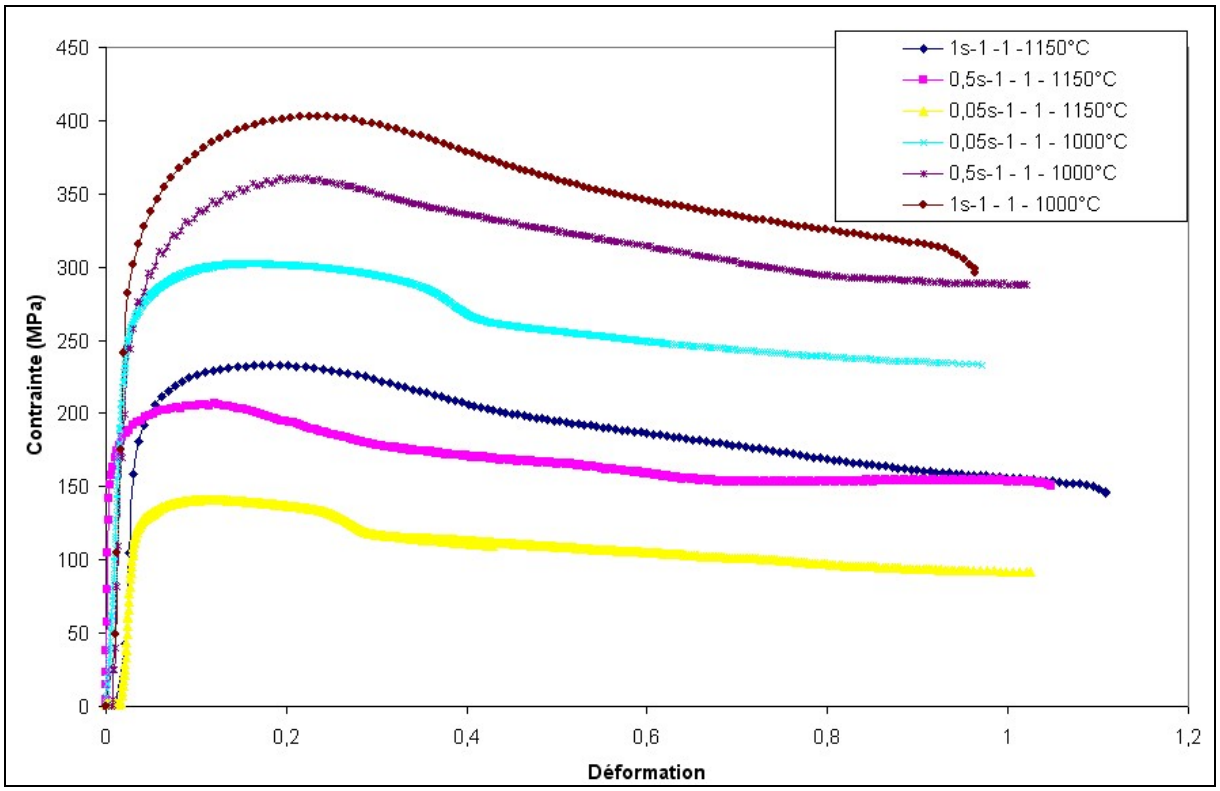


Figure VII.11 *Courbes contrainte-déformation des essais de compression sur l'URB66 corroyé : influence de la vitesse de déformation et de la température sur les niveaux de contrainte et de déformation.*

VII.2.1.2 L'URB66 brut de solidification

Deux campagnes d'essais de compression uniaxiale à chaud pour l'URB66 brut de solidification ont été réalisées.

Première campagne

La première campagne d'essais a été réalisée au CEMEF sur des éprouvettes cylindriques. La taille et le sens de prélèvement des éprouvettes sont présentés Figure VII.12. Les éprouvettes sont lubrifiées avant compression et trempées à l'eau après compression afin de figer la microstructure.

Les conditions opératoires des essais sont décrites à l'aide des paramètres suivants :

- période de maintien en température,
- T et $\dot{\varepsilon}$ constants (presse pilotée à vitesse de déformation constante), déformation finale ε fixée.

Pour les éprouvettes colonnaires et équiaxes, nous avons fait des essais à deux températures 1000°C et 1150°C et à deux vitesses de déformations différentes $0.05 s^{-1}$ et $1 s^{-1}$. Les taux de déformation choisis sont 0.5,0.7 et 0.9.

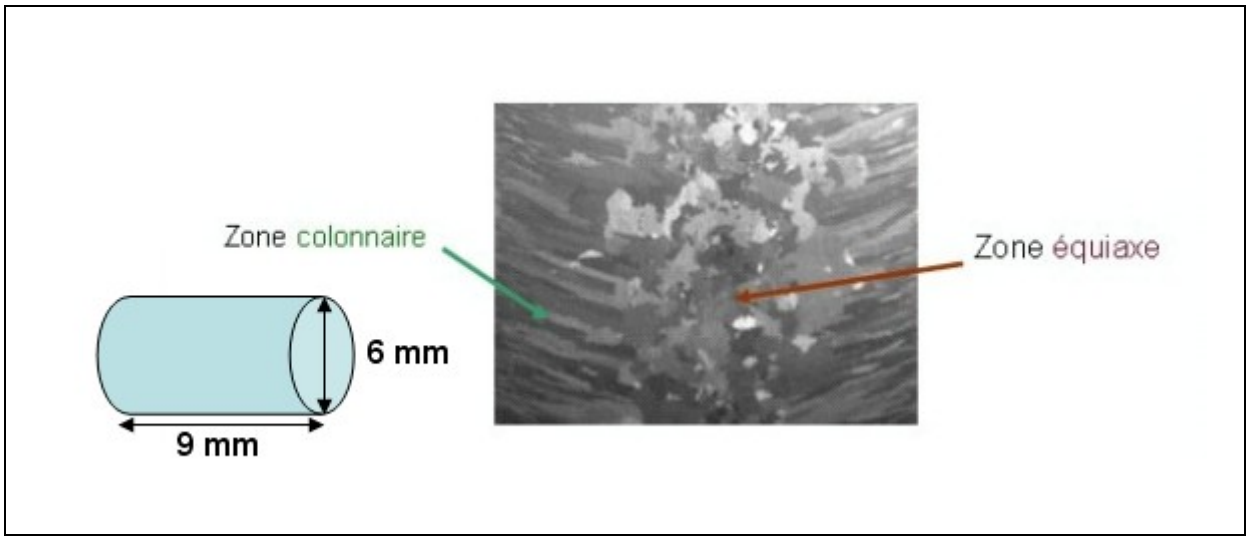


Figure VII.12 *Taille et sens de prélèvement des éprouvettes d'URB66 brut de solidification de la première campagne d'essais.*

Cette campagne d'essais n'a pas réellement donné des résultats exploitables pour la validation simulation/expérience en terme de prédiction d'anisotropie mécanique.

En effet, comme le montre la Figure VII.13, il n'y a pas reproductibilité des résultats pour la zone colonnaire. Si l'on considère le niveau de déformation de 0.4, nous avons en terme de contrainte 159MPa, 182 MPa ou 205 MPa, soit une dispersion de $\pm 13\%$ autour de 182 MPa . Cette variation est significative et ne peut pas s'expliquer par une erreur de mesure. Ces différences de niveau de contrainte sont vraisemblablement liées à l'orientation cristallographique différente des quelques grains présents dans l'éprouvette. L'éprouvette comportant très peu de grains (entre 7 et 14 grains dans l'éprouvette), le comportement mécanique ne peut pas résulter d'une moyenne statistique des comportements individuels de chacun des grains et on obtient des champs de déformation très hétérogènes avec des bandes de localisation de déformation.

Un autre résultat marquant est l'ovalisation de la surface circulaire des échantillons issus de la zone équiaxe comme on peut le voir Figure VII.14. Si l'on approxime la surface par une ellipse, on a dans le cas illustré un grand axe de 10mm et un petit axe de 6mm. L'ovalisation est en général le résultat d'une texture cristallographique orientée qui induit l'anisotropie mécanique. On ne s'attend a priori pas à ce que l'échantillon prélevé dans la zone équiaxe subisse, à l'instar d'un échantillon prélevé dans la zone colonnaire, une ovalisation dans la mesure où sa texture cristallographique initiale est normalement aléatoire. L'explication vient encore une fois du fait que, compte tenu de la taille des éprouvettes, le nombre de grains à l'intérieur n'est pas suffisant pour constituer statistiquement une texture cristallographique aléatoire.

La machine que nous avons utilisée lors de cette première campagne d'essais ne nous permettait pas une taille d'éprouvette sensiblement plus grande, sa capacité étant seulement de 10 tonnes. Pour ces raisons, nous avons réalisé une deuxième campagne d'essais sur une presse industrielle de plus grande capacité (300 tonnes) afin d'avoir des échantillons contenant un nombre statistiquement suffisant de grains.

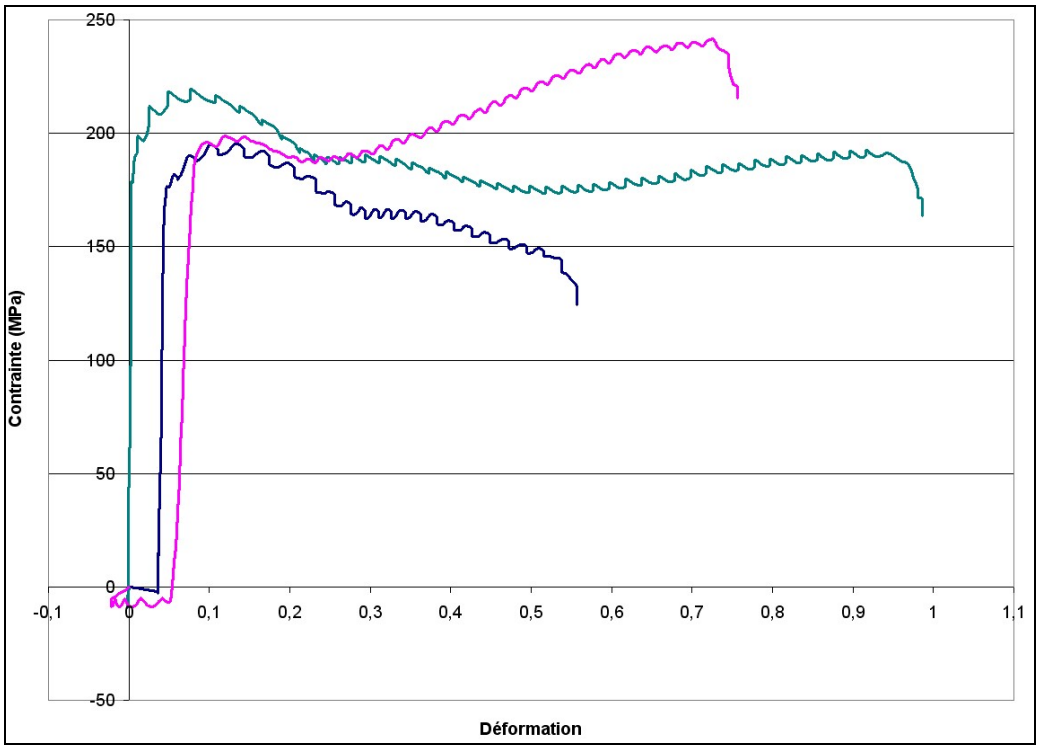


Figure VII.13 *Evolution de la contrainte en fonction de la déformation pour un échantillon colonnaire comprimé à* T=1150°C,$\dot{\varepsilon}$=1s^{-1} *et* ε *différents : illustration de la non reproductibilité des résultats.*

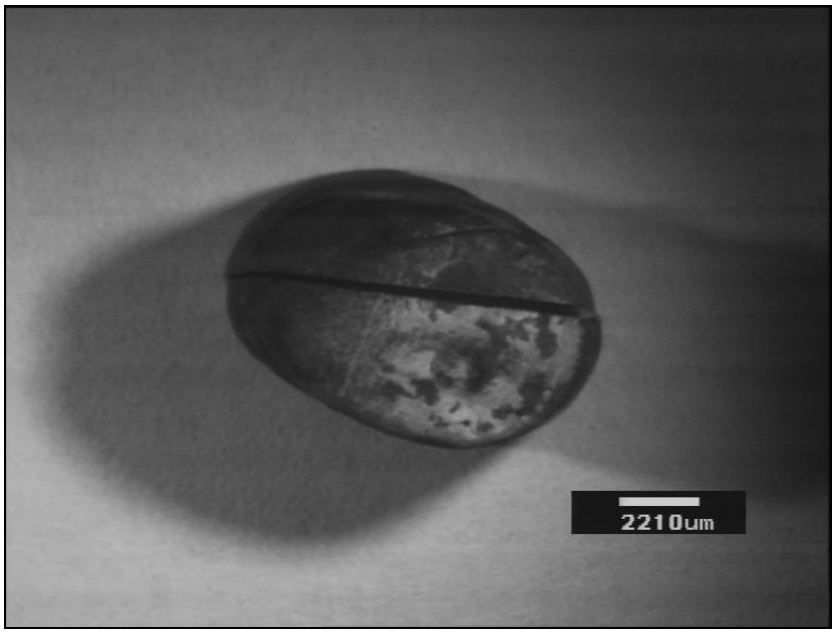


Figure VII.14 *Ovalisation de la surface de l'éprouvette à grains équiaxes après essai de compression à* T=1000°C,$\dot{\varepsilon}$=0.05s^{-1},ε=0.7 .

Cependant, la première campagne d'essais nous a permis d'étudier l'évolution de la microstructure après compression d'une éprouvette issue de la zone colonnaire à l'échelle intra-granulaire. L'analyse de la microstructure des échantillons sur une coupe longitudinale met en évidence que, même pour une déformation de 0.9, la microstructure dendritique n'a pas disparu.

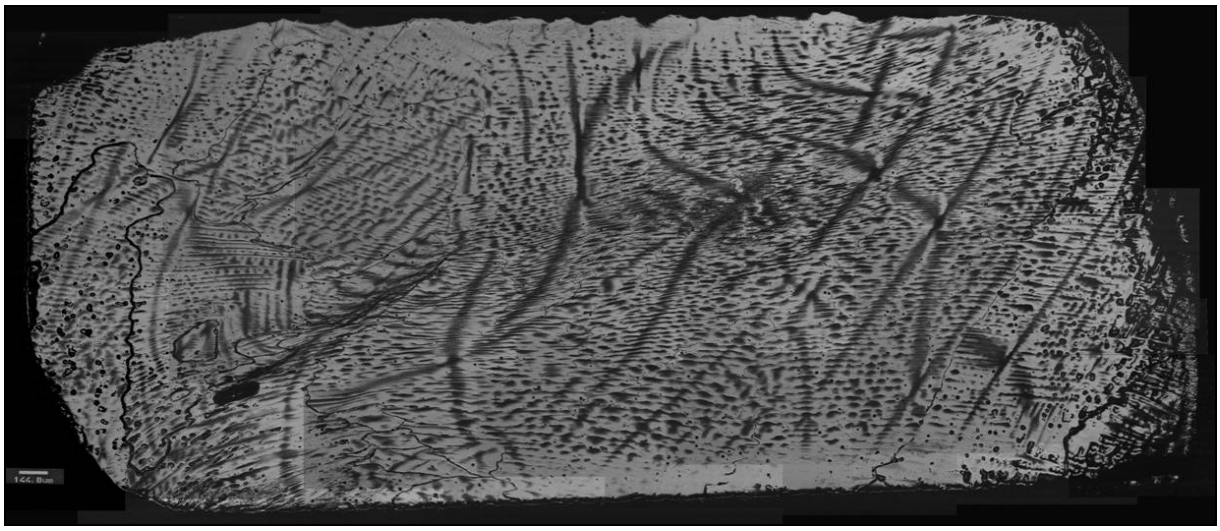


Figure VII.15 *Evolution de la microstructure sur une coupe longitudinale d'une éprouvette issue de la zone colonnaire comprimée sous* $T=1000°C, \varepsilon=0.7, \dot{\varepsilon}=0.05s^{-1}$.

(Echelle en bas à gauche de la Figure de 144 micromètres)

Nous réalisons une attaque chimique de la coupe longitudinale d'un échantillon déformé (Figure VII.15). Sur cette coupe, l'attaque chimique utilisée permet de visualiser en noir les dendrites et en blanc les parties interdendritiques. Nous remarquons que les dendrites se sont inclinées et apparaissent comme des bandes inclinées à environ 45°. Cette inclinaison rappelle celle des bandes de localisation de déformation, caractéristiques d'un essai de compression uniaxiale.

Sur un autre échantillon (soumis aux mêmes sollicitations mécaniques), nous avons analysé la coupe longitudinale à l'aide de la technique EBSD. L'analyse a mis en évidence l'apparition de désorientations cristallographiques à l'intérieur des grains sous forme de bandes (Figure VII.16). Les dendrites représentent donc des zones à comportement mécanique différent des parties inter-dendritiques, ce qui contribue à des répartitions hétérogènes de la déformation et, par conséquent, à des évolutions d'orientation cristallographique distinctes.

Les analyses de la microstructure de ces essais laissent ouvertes les questions suivantes : comment la microstructure dendritique influence-t-elle l'anisotropie mécanique ? Est-ce un facteur du premier ordre ou du second ordre par rapport à l'évolution de la texture cristallographique globale d'un échantillon ? Nous tenterons d'y répondre en partie au chapitre VIII (validation simulation/expérience).

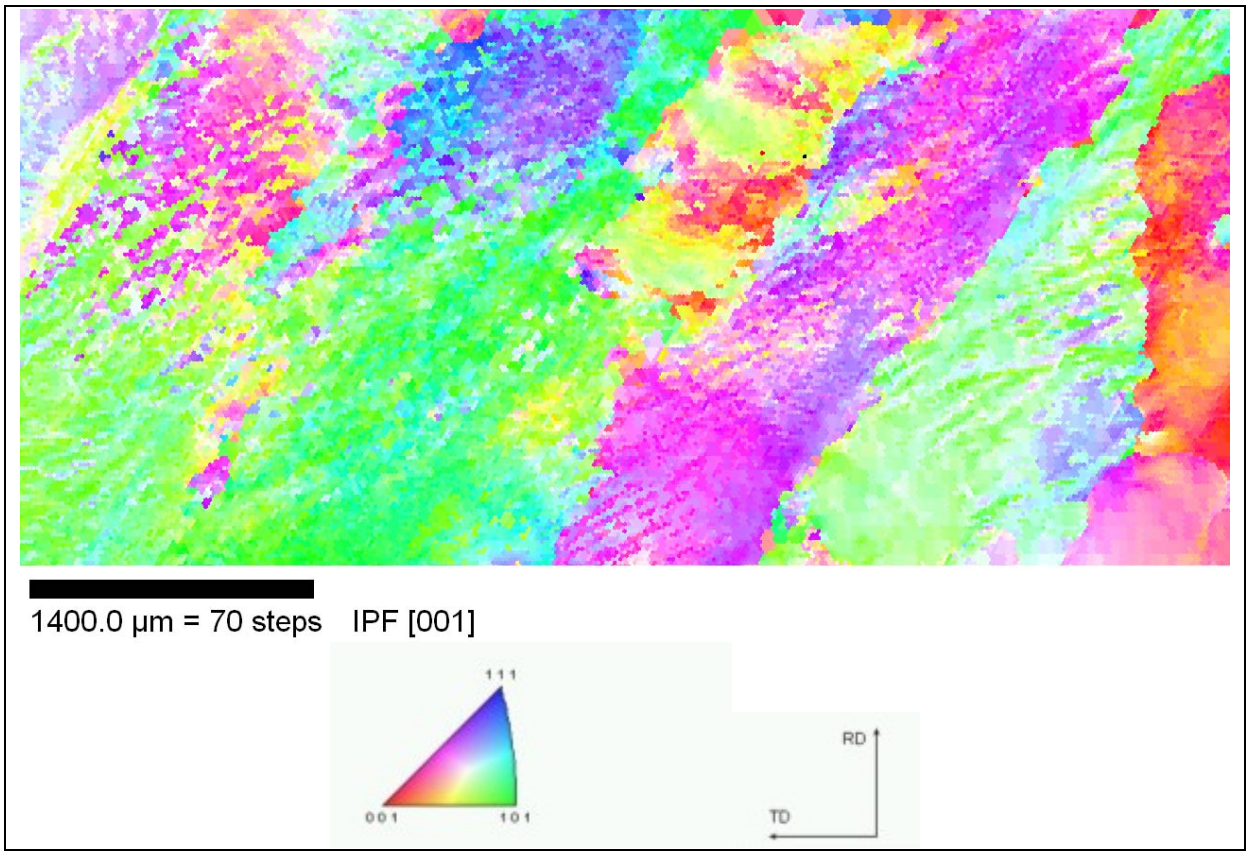


Figure VII.16 *Figure de pôle inverse (axe ND) d'une coupe longitudinale d'une éprouvette issue de la zone colonnaire comprimée sous* $T=1000°C, \varepsilon=0.7, \dot{\varepsilon}=0.05 s^{-1}$.

Deuxième campagne

La deuxième campagne d'essais a été réalisée sur la presse de Fortech Pamiers afin que les éprouvettes de compression aient des tailles plus importantes. Avec les tailles que nous considérons maintenant, le nombre de grains dans les éprouvettes est représentatif du comportement moyen d'une pièce. Le sens de prélèvement des éprouvettes et leur taille est représentée Figure VII.17. Nous considérons là encore deux zones de compression : la zone colonnaire et la zone équiaxe (A). Dans la zone colonnaire sont considérés trois types de prélèvement :

- B, où l'axe de compression est quasi-perpendiculaire au sens long des grains colonnaires
- C, où l'axe de compression est quasi-parallèle au sens long des grains colonnaires
- D, où l'axe de compression fait un angle de 45° environ avec le sens long des grains colonnaires.

Avant compression, les éprouvettes ont été couvertes d'un isolant thermique puis mises au four.

Les conditions opératoires des essais pour chaque série d'éprouvettes A, B, C et D sont :

- maintien en température avant compression
- deux températures différentes : T=1000°C et T=1150°C,
- deux vitesses de presse différentes dépendant des dimensions des éprouvettes,
  - série A et B : $v = 3 mm.s^{-1}$ et $v = 50 mm.s^{-1}$,
  - série C : $v = 2 mm.s^{-1}$ et $v = 33 mm.s^{-1}$,
  - série D : $v = 1 mm.s^{-1}$ et $v = 26 mm.s^{-1}$.

Ces différentes vitesses de presse correspondent à des vitesses de déformation moyennes d'environ $0.05\, s^{-1}$ et $1\, s^{-1}$.

Les essais sont réalisés à deux niveaux de déformation différents : $\varepsilon = 0.6$ et $\varepsilon = 0.9$.
Là encore, les éprouvettes ont été trempées à l'eau après compression afin de figer la microstructure.

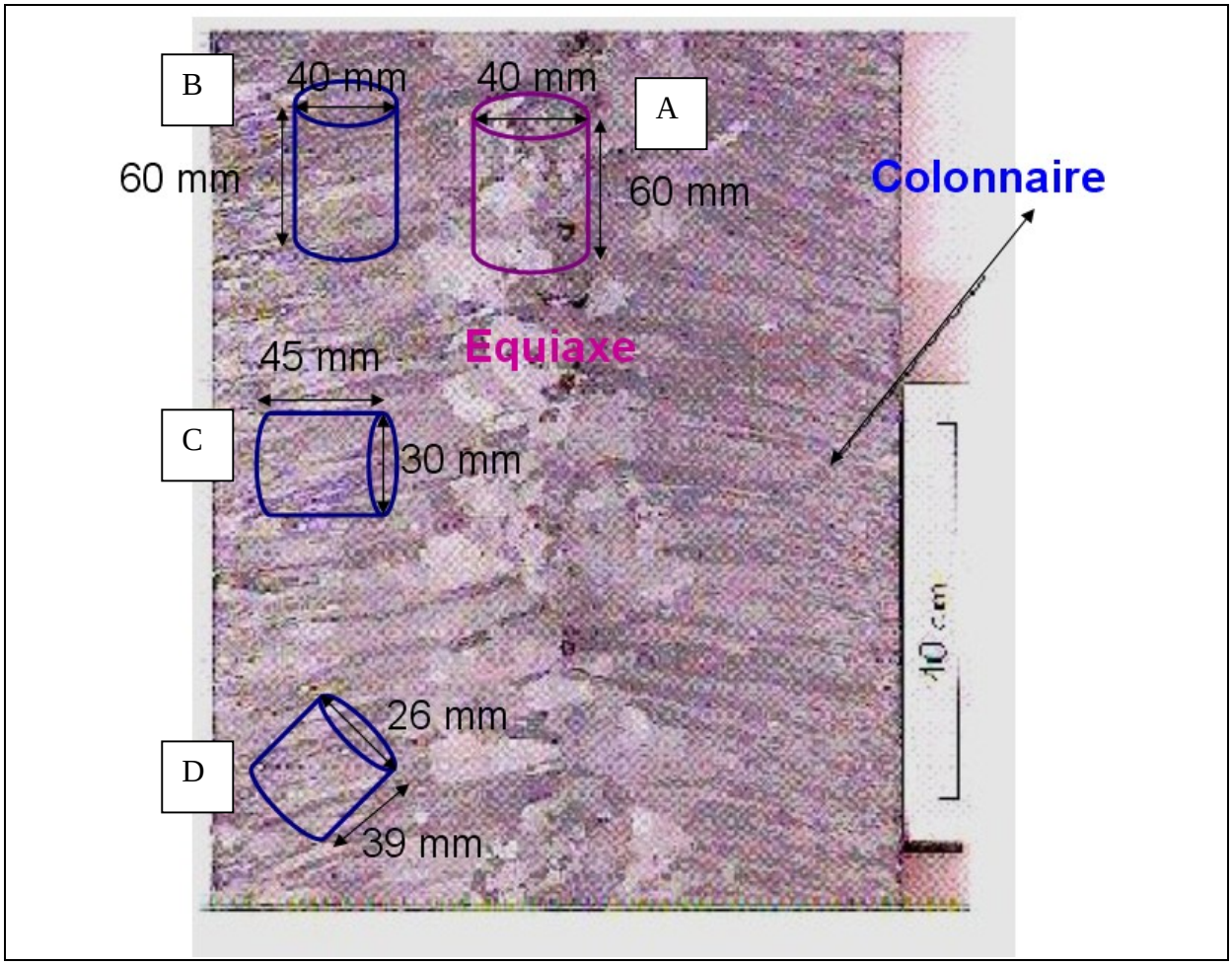


Figure VII.17 *Sens de prélèvement et taille des éprouvettes de compression d'URB66 brut de solidification (deuxième campagne d'essais).*

Nous avons reporté Figure VII.18, les courbes contrainte-déformation obtenues à l'aide des différents essais sur les éprouvettes de la série B. Nous voyons que les courbes contrainte-déformation sont très bruitées. Néanmoins, la tendance des courbes montre :

- la reproductibilité des essais (cf. courbes de la première campagne d'essais Figure VII.13),
- l'augmentation de la contrainte lorsque la température diminue,
- une légère sensibilité à la vitesse de déformation.

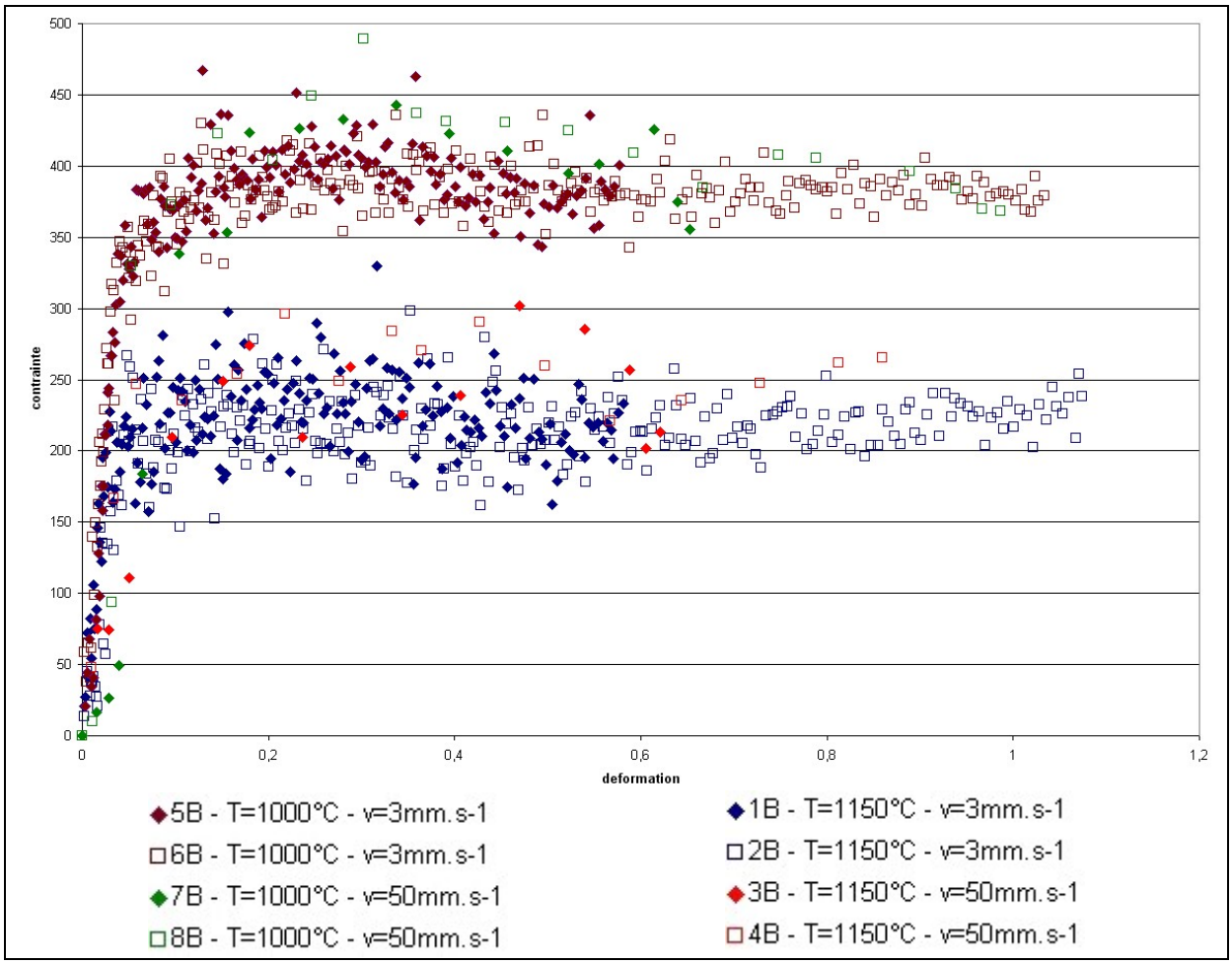


Figure VII.18 *Courbes contrainte (MPa) - déformation obtenues au cours des essais de compression de l'URB66 série B.*

On s'intéresse ensuite à la différence entre les courbes contrainte-déformation de l'URB66 corroyé et l'URB66 brut de solidification. L'analyse de la Figure VII.19 montre qu'il n'y a pas de différence majeure entre ces essais, où l'on distingue le sens de prélèvement des éprouvettes d'URB66 brut de solidification d'une part et l'URB66 corroyé d'autre part. En effet, les petites différences qui apparaissent sont vraisemblablement liées au fait que les essais pour l'URB66 brut sont réalisés à vitesse de presse constante et non à vitesse de déformation constante comme pour l'URB66 corroyé.

Les courbes contrainte-déformation exprimant la loi de comportement macroscopique du matériau ne traduisent donc pas de manière significative l'anisotropie liée à la microstructure. En d'autres termes, la variabilité liée aux conditions expérimentales des essais est au moins aussi importante que celle issue des variations d'anisotropie.

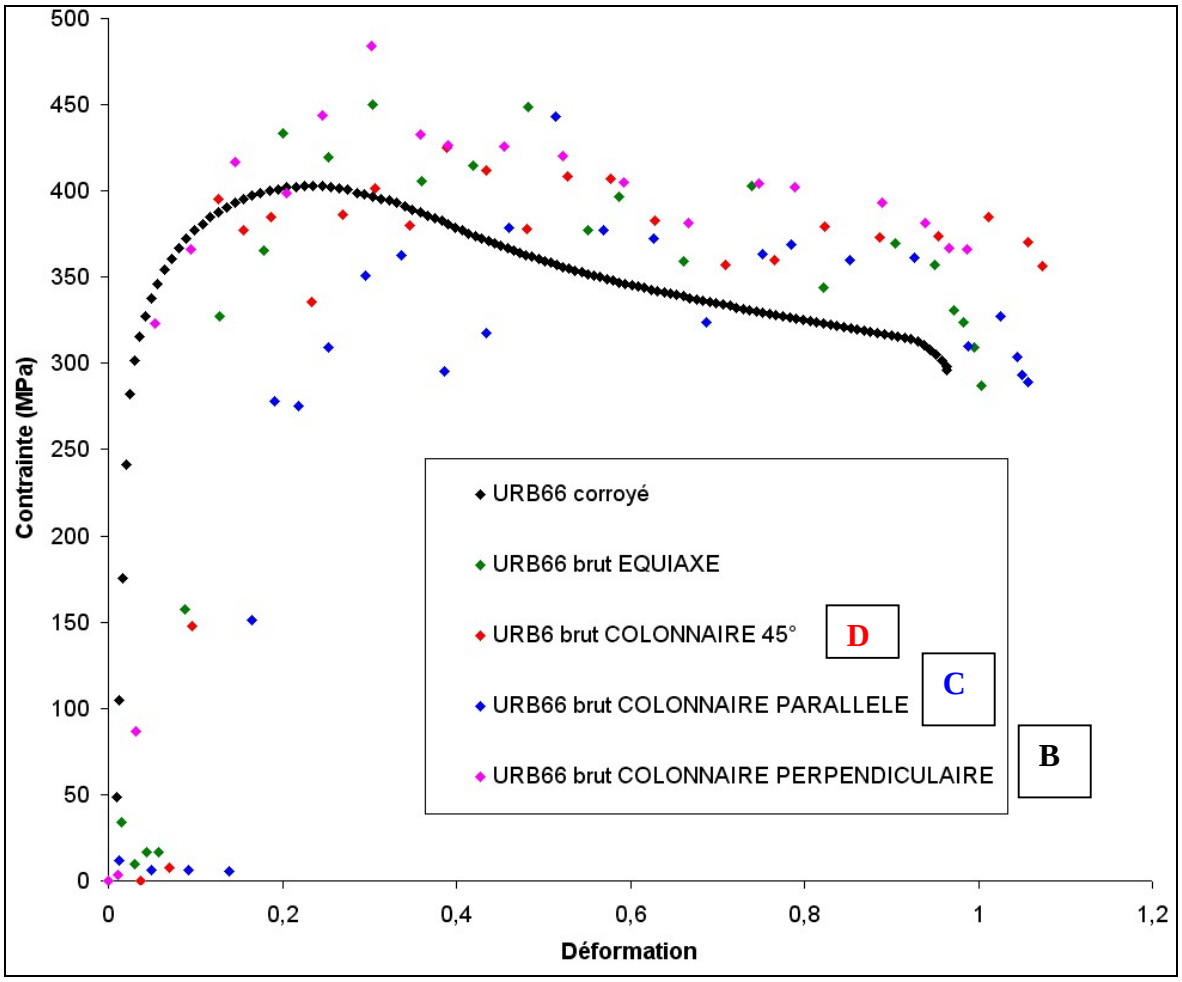


Figure VII.19 *Comparaison des courbes contrainte-déformation pour les différentes éprouvettes de l'URB66 brut de solidification et l'URB66 corroyé à T=1000°C et une vitesse de déformation moyenne de 1* s^{-1}.

VII.2.1.3 L'AA7175 filé

Les essais de compression pour l'AA7175 filé ont été réalisés chez Manoir Industries sur des éprouvettes cylindriques avec méplat (largeur du méplat de 16.6 mm), de 175mm de long, 70mm de diamètre et 68mm de hauteur au niveau du méplat (Figure VII.20).

Les essais de compression sont des écrasements sur la génératrice, c'est-à-dire perpendiculairement à l'axe de l'échantillon. Les conditions opératoires sont :

- température du lopin constante $T = 350°C$,
- vitesse de presse constante. Deux vitesses de presse sont étudiées : v=15$mm.s^{-1}$ et v=6$mm.s^{-1}$,
- deux déformations, ε =0.5 et 0.9, soit un taux d'écrasement de 40 et 60%.
- avec et sans lubrifiant. Le lubrifiant utilisé est une huile graphitée et a été appliqué par pulvérisation.

Lors de ces essais, la température a été mesurée par pyromètre optique pour les outillages et par thermosonde pour les lopins. Les températures obtenues pour l'ensemble des essais sont de 250°C pour l'outil du bas, 280°C pour l'outil du haut et environ 340°C pour la température finale du lopin.



Figure VII.20 *Eprouvette de compression AA7175 filé vue de dessus, au niveau du méplat.*

Les courbes contraintes-déformation n'ont pas été enregistrées lors des essais mécaniques. Cependant, le travail réalisé par Rajeev Gupta lors de son stage au CEMEF pour Manoir Industries a permis de déterminer une loi de comportement de ce matériau dépendant de la température et de la vitesse de déformation (travaux confidentiels).

VII.2.2 Analyse de l'anisotropie mécanique et de l'évolution de texture cristallographique après déformation

VII.2.2.1 L'URB66 corroyé

Anisotropie mécanique

Après compression, les éprouvettes d'URB66 corroyé restent de section transverse quasi circulaire. Il n'y a pas d'ovalisation comme le montre la Figure VII.21. Ce résultat correspond au fait que la texture initiale (Figure VII.2) était à peu près aléatoire.

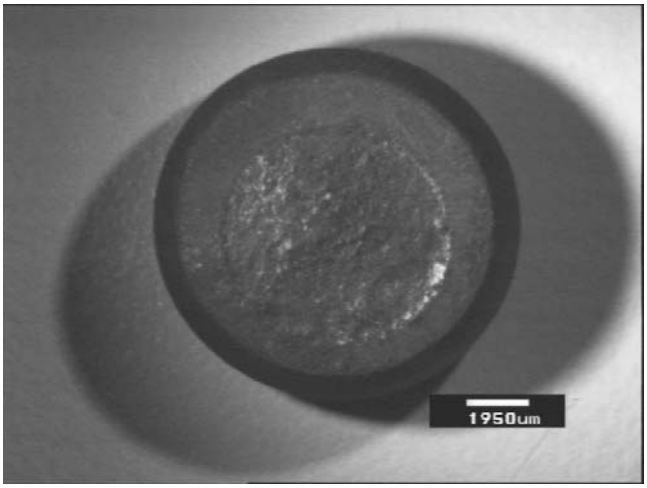


Figure VII.21 *Vue de dessus de l'éprouvette d'URB66 corroyé après compression sous les conditions* T=1150°C,$\dot{\varepsilon}$=0.05s^{-1},ε=1.

Texture cristallographique

La texture cristallographique après compression à chaud a été mesurée pour l'éprouvette comprimée à $T = 1000°C / \dot{\varepsilon} = 1s^{-1} / \varepsilon = 0.6$. Elle est illustrée Figure VII.22. Le pôle au centre de la Figure de pôle {101} est typique d'un essai de compression sur un matériau de symétrie CFC à texture initiale aléatoire.

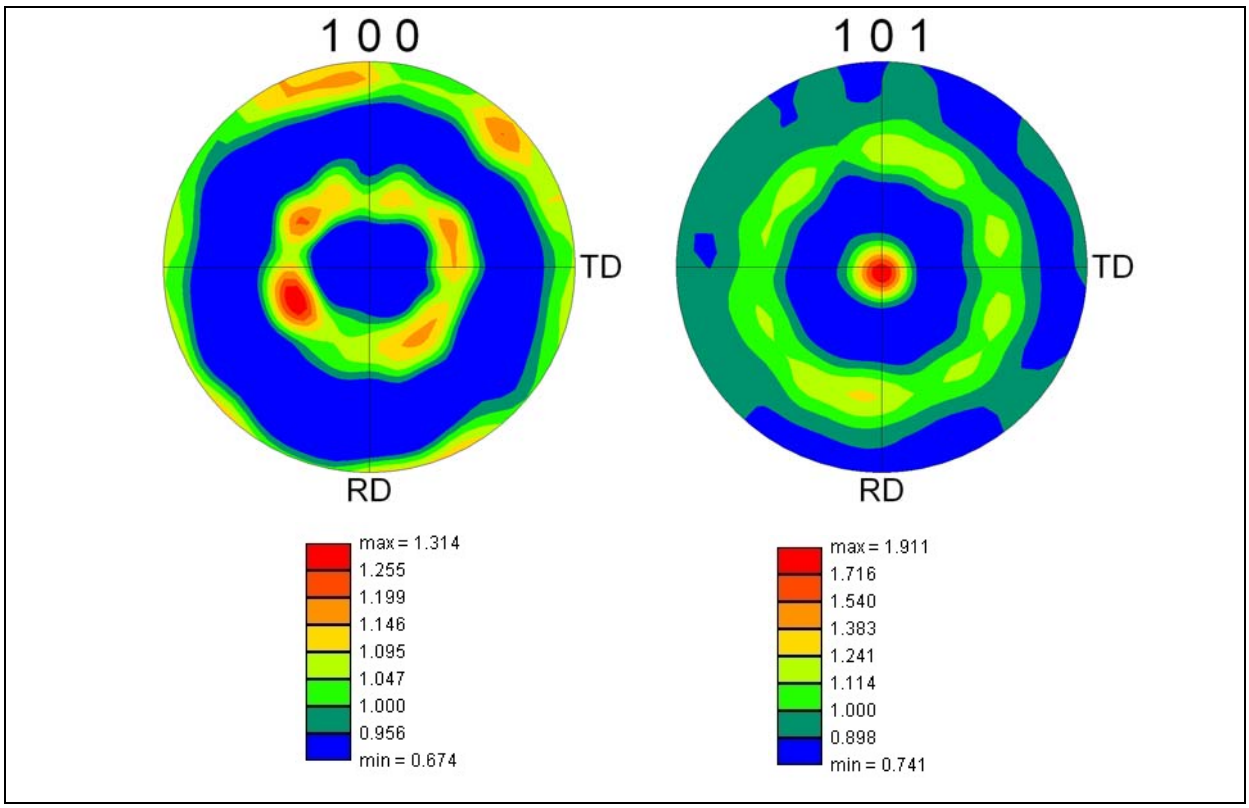


Figure VII.22 *Figures de pôle {100} et {101} de l'URB66 corroyé après compression à* $T = 1000°C / \dot{\varepsilon} = 1s^{-1} / \varepsilon = 0.6$

VII.2.2.2 L'URB66 brut de solidification

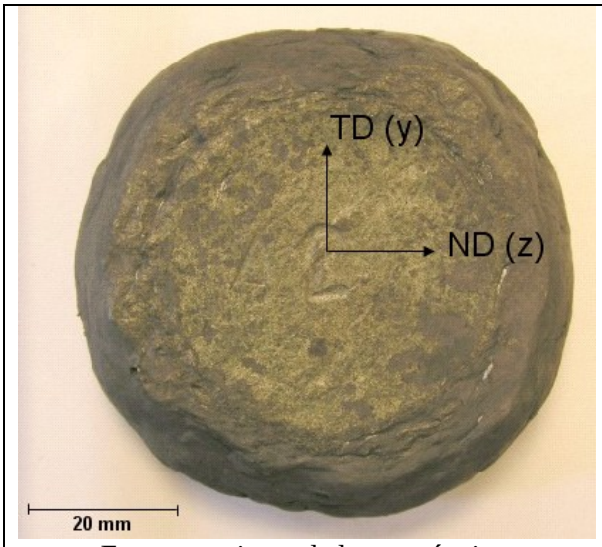
Nous ne discuterons ici que des résultats de la deuxième campagne d'essais, les résultats obtenus lors de la première campagne d'essais ayant été discutés antérieurement (cf. VII.2.1.2).

Anisotropie mécanique

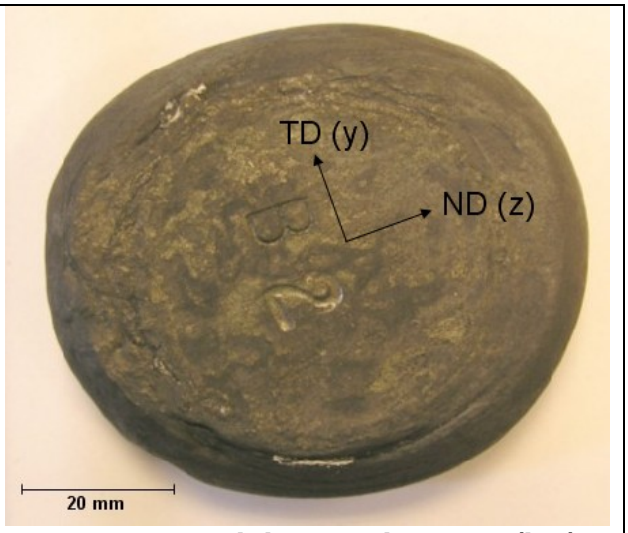
Après compression, les éprouvettes d'URB66 brut de solidification ne présentent pas toutes la même ovalisation pour des conditions opératoires identiques, selon la zone de prélèvement et le sens de prélèvement (Figure VII.23).

Nous remarquons que l'éprouvette issue de la zone équiaxe ne présente pas d'ovalisation du fait de sa texture initiale aléatoire. Nous avons donc une distribution de grains suffisamment aléatoire (environ 1200 grains dans l'éprouvette).

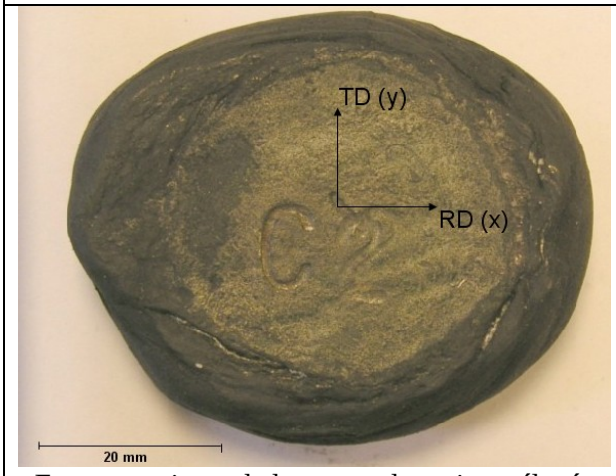
Les éprouvettes issues de la zone colonnaire présentent toutes une ovalisation plus ou moins marquée et fonction du sens de prélèvement des éprouvettes par rapport au sens long des grains comme le montre la Figure VII.23.



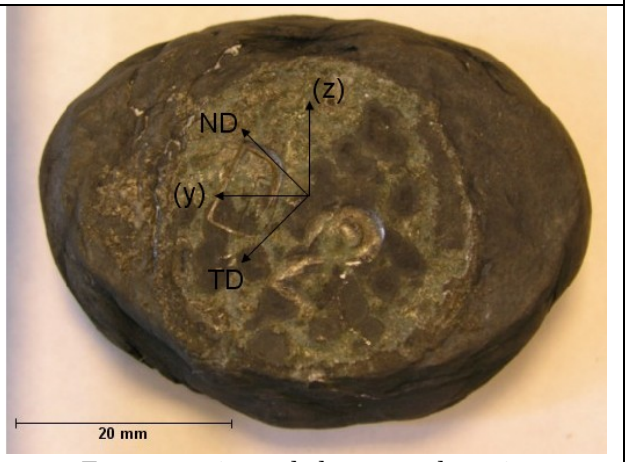
Eprouvette issue de la zone équiaxe.
$T = 1150°C / v = 3mm.s^{-1} / \varepsilon = 1$



Eprouvette issue de la zone colonnaire prélevée selon B.
$T = 1150°C / v = 3mm.s^{-1} / \varepsilon = 1$



Eprouvette issue de la zone colonnaire prélevée selon C.
$T = 1150°C / v = 2mm.s^{-1} / \varepsilon = 1$



Eprouvette issue de la zone colonnaire prélevée selon D.
$T = 1150°C / v = 1mm.s^{-1} / \varepsilon = 1$

Figure VII.23 *Vues de dessus des éprouvettes d'URB66 brut de solidification issues de la zone colonnaire et équiaxe après compression à chaud.*

L'analyse des différents rapports d'ovalisation obtenus sur l'ensemble des essais pour les éprouvettes issues de la zone colonnaire montre que le rapport d'ovalisation obtenu après compression dépend des trois facteurs suivants :

- la sollicitation thermo-mécanique,
- le sens de prélèvement des éprouvettes,
- le frottement.

L'intensité du frottement peut être mesurée à l'aide du bombé de l'éprouvette. Lorsque la température ou la déformation augmentent, ou lorsque la vitesse de déformation diminue, l'intensité du frottement augmente. Nous remarquons que lorsque le bombé augmente, le rapport d'ovalisation diminue. Le frottement tend donc à « gommer » l'anisotropie induite par la texture cristallographique.

Pour une sollicitation thermo-mécanique identique, nous nous apercevons que le rapport d'ovalisation est différent selon le sens de prélèvement de l'éprouvette (les bombés étant quasi-

identiques eux-aussi). Nous avons l'inégalité suivante sur les rapports d'ovalisation des différentes éprouvettes :

$$R_B < R_C < R_D$$

avec : $R = \frac{b-a}{b}$

où R représente le rapport d'ovalisation, b et a respectivement le grand axe et le petit axe de l'ellipse associée à la surface de la section mesurée à mi-hauteur pour le taux de compression final. L'indice B,C,D représente le type d'éprouvettes (Figure VII.17). Cette inégalité met en évidence l'effet de la texture cristallographique.

Texture cristallographique

La texture cristallographique a été mesurée après déformation uniquement sur une éprouvette de la série B soumise aux conditions opératoires suivantes :

$$T = 1150°C / v = 3mm.s^{-1} / \varepsilon = 1.$$

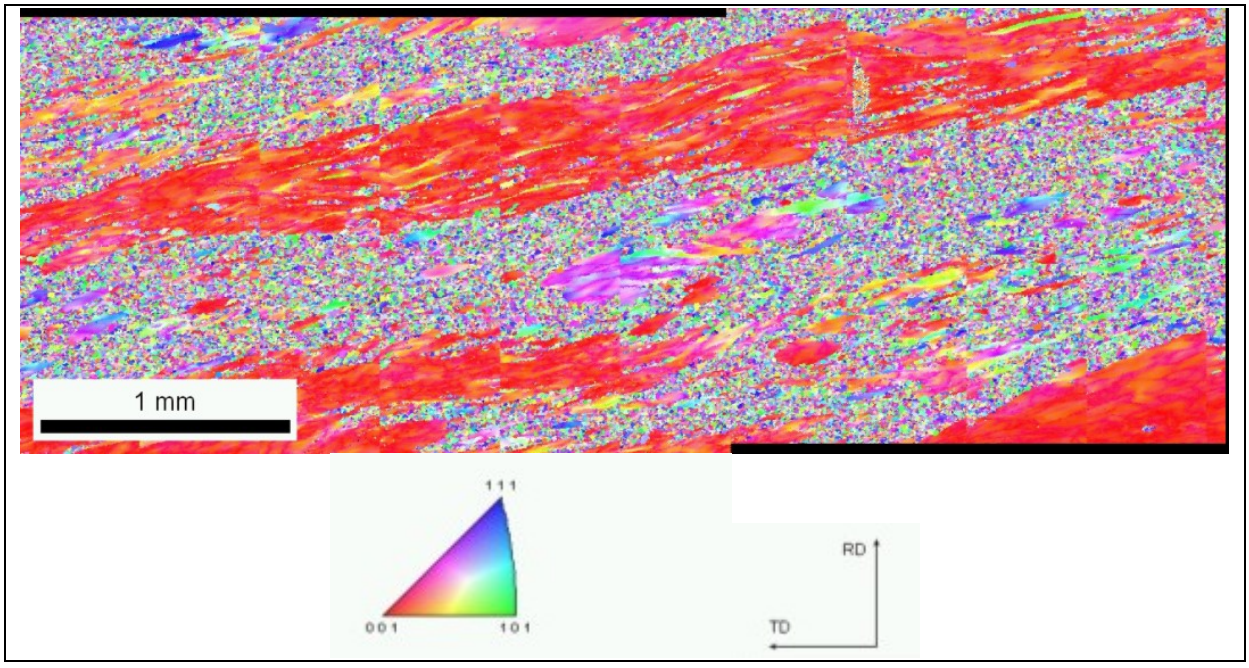


Figure VII.24 *Figure de pôle inverse [001] de l'URB66 brut de solidification (série B) après compression à* $T = 1150°C / v = 3mm.s^{-1} / \varepsilon = 1.$ *La texture est mesurée sur une zone au cœur du lopin.*

La figure de pôle inverse obtenue est représentée Figure VII.24. Nous remarquons que nous avons après déformation deux populations de grains : des grains qui sont restés allongés et orientés à environ 45° par rapport à l'axe de compression et des petits grains. Afin de vérifier si les petits grains sont issus de processus de recristallisation, nous avons mesuré la texture cristallographique représentée par les gros grains et celle par les petits grains. Les résultats sont représentés Figure VII.25. L'analyse des résultats permet de mettre en évidence que les petits grains sont des grains recristallisés puisque leur texture cristallographique est à peu près aléatoire. La texture globale de l'échantillon est donc du point de vue de la forme de la figure de pôle identique à celle des gros grains déformés. L'existence des petits grains vient seulement affecter le niveau d'intensité de la figure de pôle en ajoutant un bruit de fond et donc en diminuant les intensités.

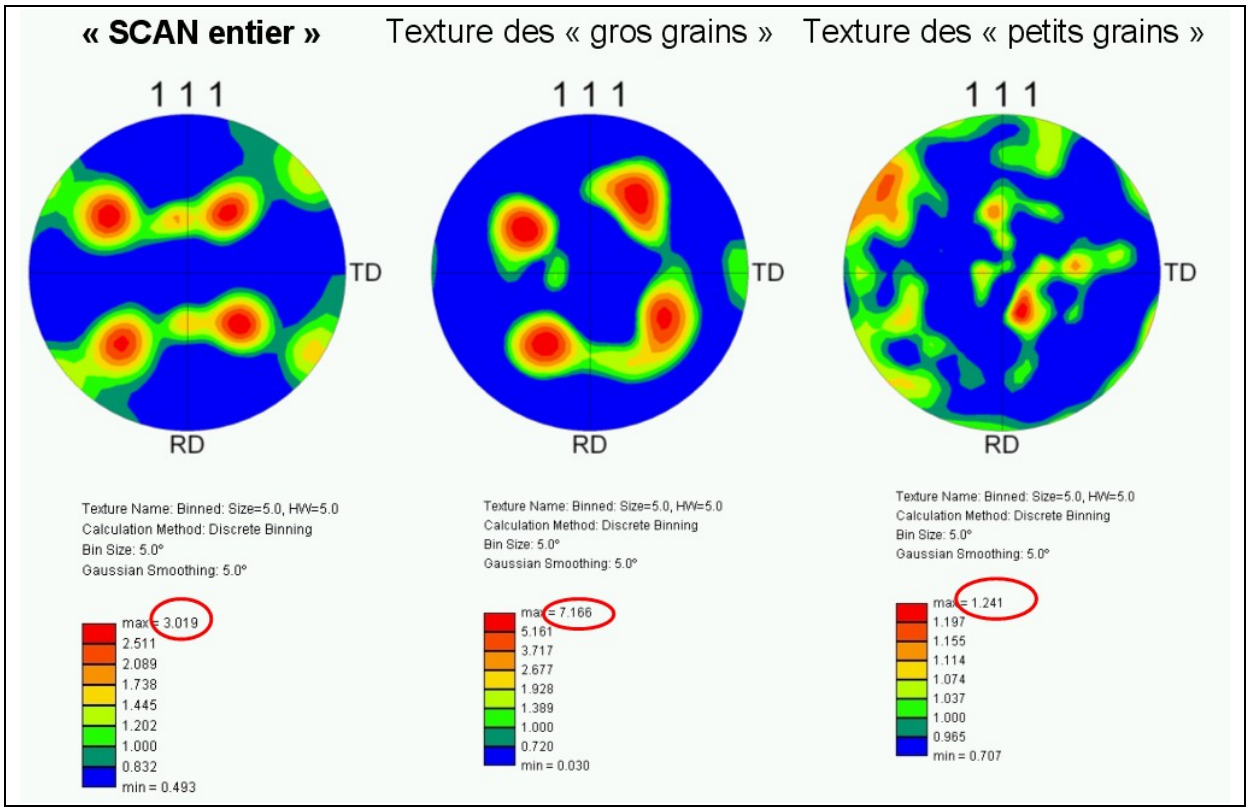
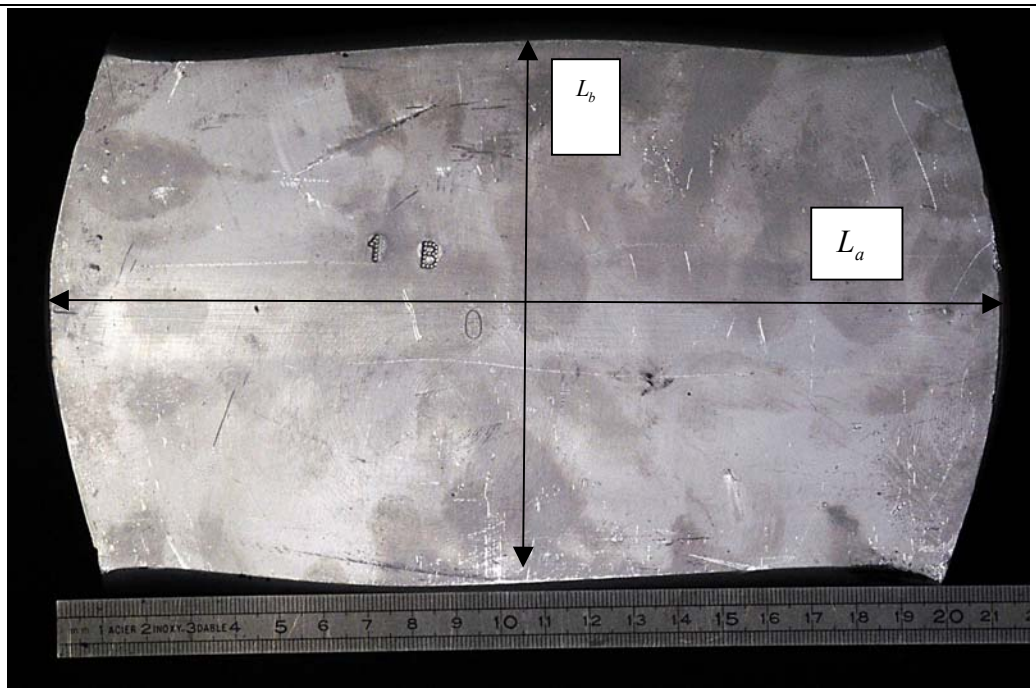


Figure VII.25 *Figure de pôle {111} de l'URB66 brut de solidification (série B) après compression à* $T = 1150°C / v = 3mm.s^{-1} / \varepsilon = 1$. *La texture est mesurée sur une zone au cœur du lopin.*

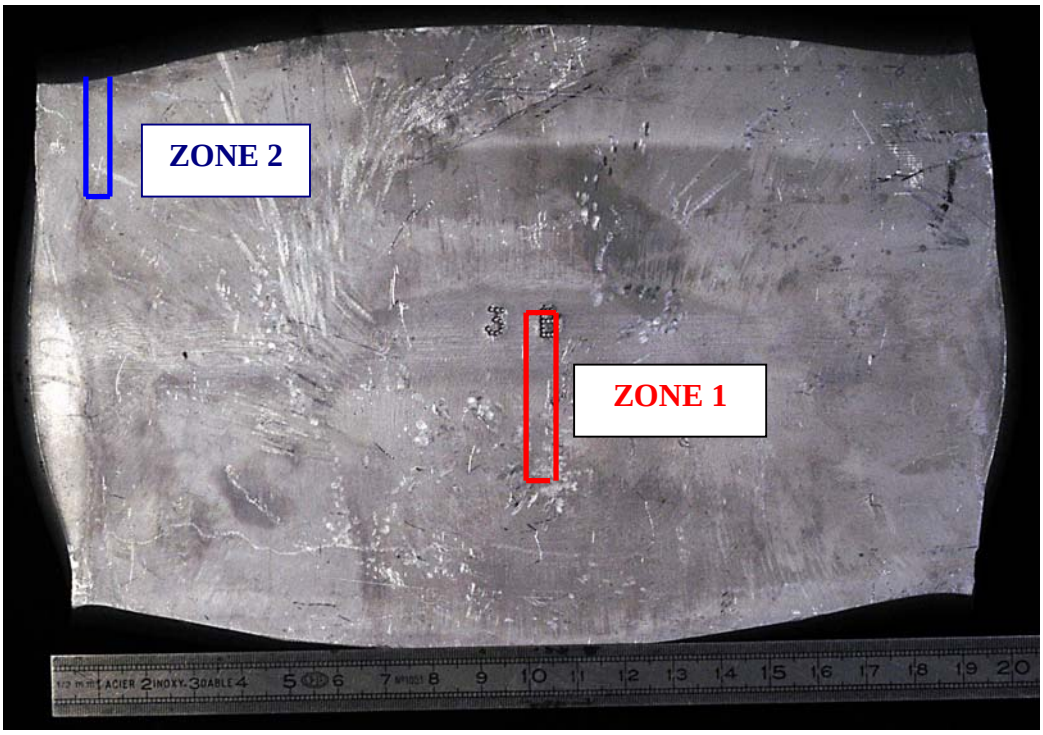
VII.2.2.3 L'AA7175 filé

Anisotropie mécanique

Pour mesurer l'anisotropie mécanique sur les éprouvettes d'AA7175 comprimées, nous avons mesuré le rapport suivant (comme illustré Figure VII.26) : $\frac{L_a}{L_b}$ où L_a représente la grande longueur et L_b la petite longueur, toutes deux dans un plan perpendiculaire à l'axe de compression et mesurées à mi-hauteur. Nous remarquons que le rapport $\frac{L_a}{L_b}$ est plus petit pour l'éprouvette non lubrifiée par rapport à celui obtenu pour l'éprouvette lubrifiée (cf. Figure VII.26).



Eprouvette initialement lubrifiée



Eprouvette initialement non lubrifiée

Figure VII.26 *Vue de dessus de l'éprouvette d'AA7175 filé après compression,* $T = 380°C, v = 15mm.s^{-1}, \varepsilon = 60\%$.

Texture cristallographique

Nous avons mesuré la texture cristallographique de l'AA7275 après déformation à $T = 380°C, v = 15mm.s^{-1}, \varepsilon = 60\%$ dans deux zones différentes :

- la première zone se situe au cœur du lopin et représente une zone très déformée. Cette zone est schématisée Figure VII.26 et est appelée ZONE 1.
- la deuxième zone se situe proche du bord où la déformation est plus faible. Elles est schématisée Figure VII.26 et est appelée ZONE 2.

Les figures de pôle obtenues sont représentées Figure VII.27 pour la zone la moins déformée (ZONE 2) et Figure VII.28 pour la zone la plus déformée (ZONE 1). Les figures de pôle sont différentes selon la zone observée. Dans le cas de la zone la plus déformée, les pôles sont très marqués (composantes cube et direction [111] parallèle à ND). Dans le cas de la zone peu déformée, les pôles commencent à peine à évoluer par rapport à la texture initiale (cf. Figure VII.9).

Pour comprendre l'effet de la texture sur les profils d'écoulement, nous comparerons, dans le chapitre VIII, les profils expérimentaux à ceux obtenus à l'aide d'une loi de comportement isotrope et d'une loi de comportement anisotrope.

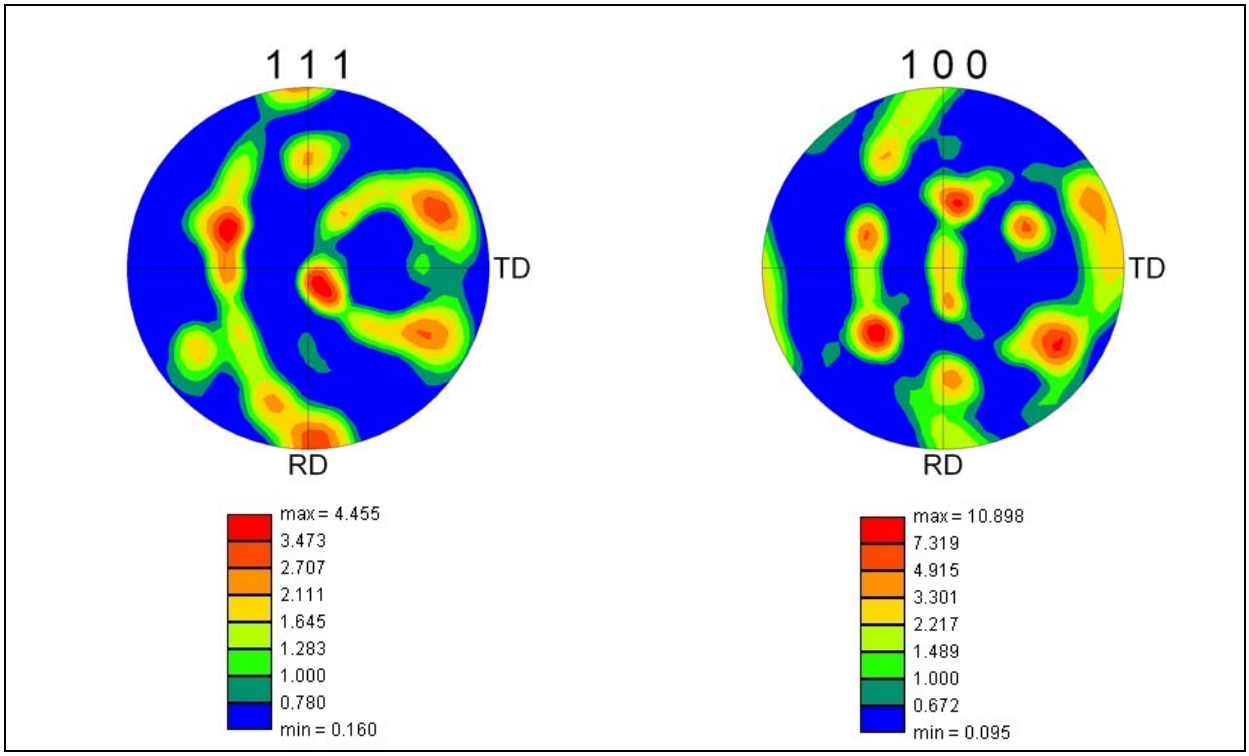


Figure VII.27 *Figures de pôles de l'AA7175 filé après compression à* $T = 380°C, v = 15mm.s^{-1}, \varepsilon = 0.9$ *dans une zone peu déformée proche du bord (ZONE 2).*

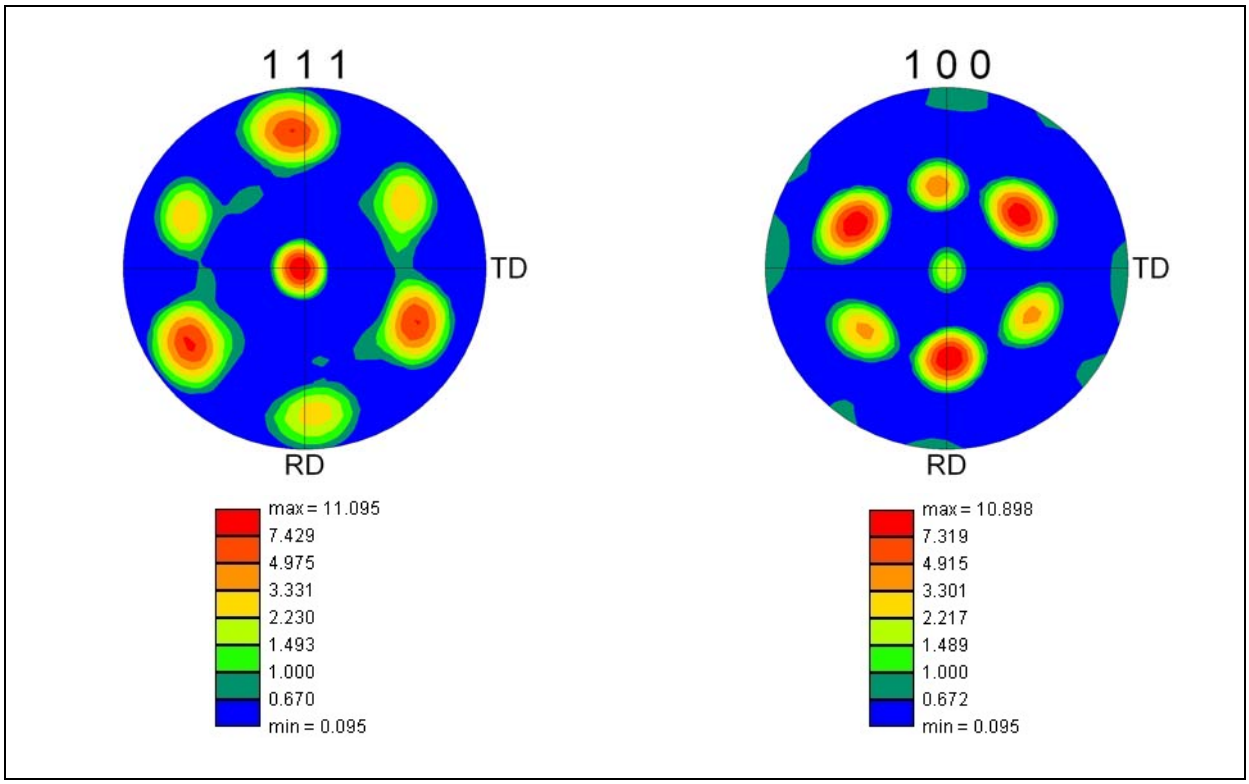


Figure VII.28 *Figures de pôles après déformation de l'AA7175 filé à* $T = 380°C, v = 15mm.s^{-1}, \varepsilon = 0.9$ *dans la zone très déformée au cœur du lopin (ZONE 1).*

Conclusion

Les différentes expériences réalisées sur l'URB66 brut de solidification et l'URB66 corroyé corroborent le fait qu'une texture cristallographique orientée induit une anisotropie mécanique mesurable. Cette anisotropie mécanique nécessite pour être modélisée de prendre en compte les effets de texture. Concernant l'URB66 brut de solidification, il reste à déterminer si la microstructure dendritique et la texture chimique influencent l'anisotropie mécanique, ou s'il s'agit d'un facteur de second ordre par rapport à la texture cristallographique. Dans le chapitre suivant, nous apporterons une réponse à l'aide de la simulation numérique.

Les expériences réalisées sur l'AA7175 filé ne nous permettent pas de juger clairement de l'impact de la texture cristallographique sur l'anisotropie dans ce cas de figure. De ce fait, dans le chapitre suivant, nous allons comparer les résultats expérimentaux à ceux obtenus à l'aide de la simulation (a) avec une loi de comportement isotrope et (b) avec une loi de comportement anisotrope.

L'ensemble des résultats expérimentaux présentés dans ce chapitre va nous permettre de valider les modèles numériques présentés aux chapitres précédents et en particulier la méthode des particules Lagrangiennes.

Références bibliographiques

[BER 2003] M. BERINGHIER, Caractérisation des microstructures de solidification. Mémoire bibliographique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Avril 2003.

[HAU 1989] J.M. HAUDIN and F. MONTHEILLET, Les essais mécaniques. In : J.M. HAUDIN and F. MONTHEILLET, Notions fondamentales sur les matériaux. Déformation plastique et essais mécaniques. Paris : S.N.P.M.D., pp. 64-79, 1989.

[JAC 2001] S. JACOMET, Analyse d'images en sciences des matériaux. TD MATMEF Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - CEMEF, Novembre 2001.

[JAC 2000] S. JACOMET, Métallographie. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - CEMEF, Juillet 2000.

[KUR 1989] W. KURZ and D.J. FISHER, Fundamentals of solidification. Third edition. Trans. Tech. Publ., Aedermannsdorf, Suisse, 1989.

[LES 1989] G. LESOULT, Solidification. Macrostructures et qualité des produits, Techniques de l'Ingénieur M 59, octobre 1989.

[POK 1967] A. POKORNY and J. POKORNY, La solidification des aciers. In : A. POKORNY and J. POKORNY, Institut de Recherches de la Sidérurgie Française eds. De Ferri Metallographia Vol. III. Paris, Nancy : Berger-Levrault, 1967.

[REP 2002] M. REPOUX, Microscopie Electronique à Balayage et Microanalyse. TP MATMEF Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris - CEMEF, Année 2002-2003.

[WAL 1959] D. WALTON and B. CHALMERS, The Origin of the Preferred Orientation in the Columnar Zone of Ingots, Transaction of the Metallurgical Society of AIME vol. 215, pp. 447-457, 1959.

Chapitre VIII

Validation des implémentations numériques par comparaison avec l'expérience

Sommaire

VIII.1 Calibrage des paramètres du modèle polycristallin et de la loi de frottement ….... 177
VIII.1.1 Paramètres du modèle polycristallin …… 177
VIII.1.2 Coefficients de la loi de frottement …… 178
VIII.2 Validation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin et méthode de distribution des orientations : cas de compression uniaxiale de l'URB66 brut de solidification …….. 179
VIII.2.1 Présentation des simulations ……... 179
VIII.2.1.1 Paramètres du modèle polycristallin …….. 179
VIII.2.1.2 Coefficients de la loi de frottement ……... 180
VIII.2.1.3 Conditions opératoires des simulations …… 180
VIII.2.1.4 Géométrie et maillage des lopins …….. 181
VIII.2.1.5 Mise en place de la méthode de distribution des orientations ……... 181
VIII.2.2 Résultats des simultations …….. 181
VIII.2.2.1 Détermination des coefficients de frottement ……..……... 181
VIII.2.2.2 Prédiction de l'anisotropie mécanique …….. 182
VIII.2.3 Temps de calcul des simulations …… 183
VIII.2.4 Discussion …….. 184
VIII.3 Validation du transport des variables polycristallines lors du remaillage : écrasement sur génératrice de l'AA7175 filé …… 185
VIII.3.1 Présentation des simulations ……... 185
VIII.3.2 Résultats des simulations en terme de prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture cristallographique …… 187
VIII.3.2.1 Eprouvette lubrifiée ……... 187
VIII.3.2.2 Eprouvette non lubrifiée …… 193
VIII.3.3 Temps de calcul des simulations …… 194
VIII.3.4 Conclusion …….. 194
Conclusion ……. 194
Références bibliographiques ……... 195

Dans ce chapitre, nous cherchons à confronter les modèles numériques développés dans Forge3® aux résultats expérimentaux présentés au chapitre précédent.

Pour valider le couplage EF/modèle polycristallin et la méthode de distribution des orientations dans les EFs, nous utilisons certains des essais expérimentaux réalisés sur l'URB66 brut de solidification. Nous choisissons les essais réalisés avec les échantillons issus de la zone colonnaire car dans cette zone, l'ovalisation est significative puisque la texture initiale y est orientée.

Pour valider la stratégie de transport des variables polycristallines, nous utilisons les essais réalisés sur l'AA7175 filé. En effet, dans ce cas l'écrasement se fait le long de la génératrice et non suivant l'axe du cylindre, ce qui implique des changements de forme complexes et nécessite, au niveau de la simulation, le remaillage.

Dans une première section, nous présentons la procédure générale utilisée pour calibrer les paramètres du modèle polycristallin et de la loi de frottement. Ensuite, nous cherchons à valider le couplage EF/modèle polycristallin et la méthode de distribution des orientations. Enfin, nous nous penchons sur la stratégie de transport des variables polycristallines lors du remaillage.

VIII.1. Calibrage des paramètres du modèle polycristallin et de la loi de frottement

VIII.1.1 Paramètres du modèle polycristallin

Les courbes de nos essais mécaniques (cf. Figure VII.18) semblent indiquer que l'écrouissage de l'URB66 brut de solidification, dans la gamme de T et $\dot{\varepsilon}$ couverte, est faible. Il en est de même pour l'AA7175 filé. Pour les simulations utilisant le modèle polycristallin, nous choisissons donc de calibrer uniquement les paramètres suivants :

- la texture initiale,
- le coefficient de sensibilité à la vitesse microscopique,
- la cission critique initiale.

La texture initiale a été mesurée à l'aide de la technique EBSD dans un repère lié à la pièce. Nous appliquons donc (si nécessaire) un changement de variable pour que ce repère corresponde au repère de l'éprouvette.

Le coefficient de sensibilité à la vitesse microscopique *n* (cf. équation IV.20) est pris égal à l'inverse du coefficient de sensibilité à la vitesse macroscopique *m*. Pour évaluer *m*, nous supposons que les courbes contrainte-déformation suivent une loi de type Norton-Hoff :

$$s = 2K\left(\sqrt{3}\dot{\bar{\varepsilon}}\right)^{m-1}\dot{\varepsilon} \quad \text{(VIII.1)}$$

où *K* représente la consistance du matériau, *m* la sensibilité à la vitesse macroscopique, $\dot{\varepsilon}$ le tenseur vitesse de déformation, $\dot{\bar{\varepsilon}}$ la vitesse de déformation équivalente et *s* le tenseur de contrainte déviatorique. Dans le cas d'une compression uniaxiale selon z, (VIII.1) se réécrit :

$$s_{33} = 2K\left(\sqrt{3}\right)^{m-1}\dot{\varepsilon}_{33}{}^{m} \quad \text{(VIII.2).}$$

La consistance *K* étant inconnue, on a besoin au minimum de deux courbes contrainte-déformation obtenues pour des essais réalisés à deux vitesses de déformation différentes $\dot{\varepsilon}_a$ et $\dot{\varepsilon}_b$. Nous obtenons la valeur de la sensibilité à la vitesse macroscopique *m* à l'aide de la relation suivante [CAI 1994]:

$$m = \frac{\ln(\sigma^a / \sigma^b)}{\ln(\dot{\varepsilon}^a / \dot{\varepsilon}^b)} \quad \text{(VIII.3).}$$

La valeur de la cission critique initiale, τ_{c0}, peut s'obtenir à l'aide de différentes techniques. La première consiste à utiliser la relation :

$$\tau_{c0}=\frac{\sigma_{eq}}{\overline{M}} \quad \text{(VIII.4)}$$

où $\overline{M}$ représente le facteur de Taylor moyen qui est la moyenne des facteurs de Taylor pour l'ensemble des grains représentatifs du matériau. $\overline{M}$ est généralement pris égal à 3 dans le cas des matériaux à structure cristalline cubique ayant une texture aléatoire [KOC 1998].
Une deuxième technique consiste à simuler l'essai mécanique à l'aide d'un modèle polycristallin pour déterminer la valeur de τ_{c0} telle que les courbes contrainte-déformation expérimentale et numérique soient bien corrélées. Il s'agit d'une approximation dans la mesure où le modèle polycristallin seul ne prend pas en compte le frottement (s'il n'est pas couplé à la méthode des éléments finis). Cependant, dans le cas où le frottement est faible, elle fournit des résultats acceptables.

VIII.1.2 Coefficients de la loi de frottement

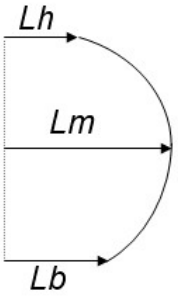
La loi de frottement utilisée pour l'ensemble des simulations est une loi de type Coulomb limitée Tresca qui s'exprime comme suit [MON 1994]:

$$\tau=\mu\sigma_n\frac{\Delta V}{\|\Delta V\|} \; si \; \mu\sigma_n<\overline{m}\frac{\sigma_0}{\sqrt{3}} \qquad \text{(VIII.5)}$$
$$\tau=\overline{m}\frac{\sigma_0}{\sqrt{3}}\frac{\Delta V}{\|\Delta V\|} \; si \; \mu\sigma_n>\overline{m}\frac{\sigma_0}{\sqrt{3}}$$

où τ est la contrainte tangentielle de frottement, σ_n la contrainte normale, σ_0 la contrainte d'écoulement, et ΔV représente la différence de vitesse tangentielle entre le lopin et l'outil.
μ, $\overline{m}$ sont les coefficients de frottement à déterminer, ils dépendent du lubrifiant utilisé, du matériau mais aussi des caractérisitiques de l'essai mécanique comme par exemple la température.

Afin de déterminer les coefficients de frottement, nous comparons les mesures du bombé obtenues numériquement pour différentes valeurs du couple $(\overline{m}, \mu)$ à la mesure du bombé obtenue expérimentalement. Nous choisirons comme couple $(\overline{m}, \mu)$, le couple qui permet d'obtenir le bombé le plus en accord avec les données expérimentales.
Pour cela, nous définissons les quantités suivantes : le rapport de bombé en haut Rh, et le rapport de bombé en bas Rb :

$$Rh = \frac{(Lh - Lm)}{Lh} \quad \text{(VIII.6)}$$
$$Rb = \frac{(Lb - Lm)}{Lb} \quad \text{(VIII.7)}$$



où Lm est la longueur à mi-hauteur d'écrasement, Lh la longueur en haut et Lb en bas des échantillons après écrasement comme représentées sur le schéma ci-dessus. Dans le cas des matériaux anisotropes, nous considérons ces deux grandeurs selon le grand axe (direction où Lm est maximal) et selon le petit axe (direction où Lm est minimal). Ensuite, nous déterminons le rapport de bombé moyen RB_{moyen} égal à la moyenne des quatre rapports de bombé.

VIII.2 Validation du couplage Forge3® / Modèle polycristallin et méthode de distribution des orientations : cas de compression uniaxiale de l'URB66 brut de solidification

Nous cherchons tout d'abord à valider le couplage du modèle polycristallin élasto-viscoplastique avec Forge3® ainsi que la méthode de distribution des orientations selon le volume. Pour cela nous simulons les essais suivants de compression uniaxiale de l'URB66 brut de solidification :

- série B : $T = 1000°C,\ v_{presse} = 3mm.s^{-1},\ \varepsilon = 1$ (VIII.8a)
- série C : $T = 1000°C,\ v_{presse} = 2mm.s^{-1},\ \varepsilon = 1$ (VIII.8b)
- série D : $T = 1000°C,\ v_{presse} = 1mm.s^{-1},\ \varepsilon = 1$ (VIII.8c).

Pour ces trois essais, les éprouvettes sont toutes issues de la zone colonnaire (cf. Figure VII.17) afin d'avoir une anisotropie marquée. Compte tenu des dimensions des éprouvettes, les 3 essais mécaniques ont une même vitesse de déformation moyenne d'environ $1\,s^{-1}$. La principale différence entre ces trois essais est liée à l'angle entre l'axe de compression et le sens long des grains colonnaires. Cette différence mène à des anisotropies mécaniques variables induites par la texture cristallographique.

VIII.2.1 Présentation des simulations

VIII.2.1.1. Paramètres du modèle polycristallin

La texture initiale

La texture initiale de l'URB66 brut de solidification issue de la zone colonnaire a été mesurée dans les axes (RD,TD,ND) de la pièce comme indiquée Figure VII.3. Nous rappelons que la texture correspond à la mesure de 2062 orientations cristallographiques.

D'après la correspondance entre les axes (RD,TD,ND) de la plaque et le sens de prélèvement des échantillons (Figure VII.17 et Figure VII.3), l'axe de compression du cylindre correspond à :

- l'axe RD dans le cas de la série B
- l'axe ND dans le cas de la série C.

Dans le cas de l'éprouvette de la série D, nous devons effectuer une rotation de -45° autour de TD afin de définir correctement la texture initiale. La texture des échantillons de la série D est représentée Figure VIII.1. L'axe RD correspond à l'axe de compression du cylindre.

Paramètres des lois polycristallines

Les paramètres des lois polycristallines utilisés dans les simulations sont répertoriés Tableau VIII.1. Ces paramètres sont à priori intrinsèques au matériau et ne dépendent donc pas du sens de

prélèvement des éprouvettes. Ils ont été établis comme indiqué précédemment à l'aide des courbes expérimentales contrainte-déformation de l'URB66 brut de solidification pour la température de 1000°C. Les constantes élastiques (C_{11}, C_{12}, C_{44}) ont été prises égales à celle du Fer [HOS 1993].

Remarque : Nous avons surestimé les constantes élastiques en utilisant comme référence les coefficients à température ambiante du Fer. Cependant, nous avons vérifié que cela n'avait pas d'incidence sur la prédiction d'anisotropie, ceci est lié au fait que nous étudions des simulations en grandes déformations.

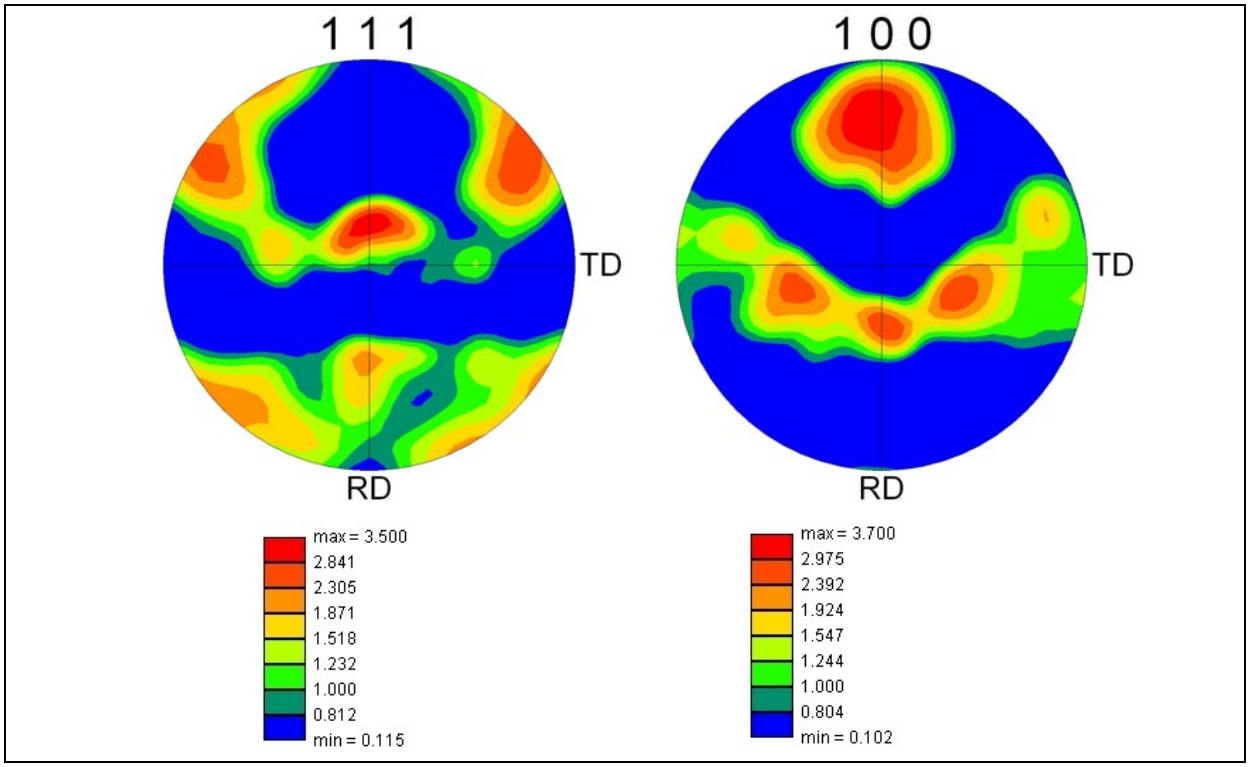


Figure VIII.1 *Figures de pôle {111} et {100} des éprouvettes de la série D*

n	τ_{c0} (MPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
9.25	140	231.4	134.7	116.4

Tableau VIII.1 *Paramètres des lois polycristallines pour l'URB66 brut de solidification pour les conditions VIII.11 d'essais mécaniques.*

VIII.2.1.2. Coefficients de la loi de frottement

Pour déterminer les coefficients $(\overline{m}, \mu)$ de la loi de frottement, nous testons les différents couples $(\overline{m}, \mu)$ suivants : (0.1, 0.05) - (0.2,0.1) - (0.3,0.15). A l'aide de la mesure des rapports de bombé obtenus pour ces différentes simulations, nous cherchons à déterminer le couple $(\overline{m}, \mu)$ le plus adapté.

VIII.2.1.3. Conditions opératoires des simulations

Les conditions opératoires des simulations sont les mêmes que celles données dans les relations (VIII.11) et correspondent aux conditions expérimentales. Nous n'effectuons aucun calcul thermique, le calcul est purement mécanique. Le modèle de comportement rhéologique choisi est le modèle élasto-viscoplastique de Taylor exposé chapitre IV section IV.1.2 qui utilise l'hypothèse

d'homogénéisation de Taylor et est donc relativement bien adapté aux structures cubiques. Pour l'ensemble des simulations, nous utilisons la stratégie de couplage faible qui est beaucoup moins coûteuse en temps de calcul que celle du couplage fort, tout en gardant une bonne précision.

VII.2.1.4 Géométrie et maillage des lopins

La géométrie des lopins dépend de la série d'éprouvettes considérée (Figure VII.17). Le maillage de l'éprouvette de la série B est composé de 2158 éléments finis tétraédriques, celui de la série C 3325, et celui de la série D 2451.

VII.2.1.5 Mise en place de la méthode de distribution des orientations

Pour limiter le temps de calcul des simulations, nous attribuons des textures partielles sur les EFs (cf. chapitre V section V.2.3). Dans le Tableau VIII.2, sont répertoriées les données suivantes :

- le nombre de textures initiales distribuées dans le maillage,
- le nombre d'orientations moyen par EF correspondant.

	série B	série C	série D
nombre de textures distribuées dans le maillage	52	30	30
nombre moyen d'orientations/EF	50	19	25

Tableau VIII.2 *Paramètres de la distribution selon le volume.*

VIII.2.2 Résultats des simulations

VIII.2.2.1 Détermination des coefficients de frottement

Pour les différents résultats expérimentaux (séries B, C, D), les rapports de bombé mesurés (comme définis en VIII.1.2) sont reportés Tableau VIII.3. L'analyse du Tableau VIII.3 montre que les rapports de bombé varient entre le haut et le bas de l'éprouvette ainsi qu'entre le grand axe et le petit axe. Le rapport de bombé moyen varie quant à lui entre 0.095 et 0.11 selon le sens de prélèvement des éprouvettes. Compte tenu de l'erreur de mesure expérimentale liée à la forme des éprouvettes après compression comme le montre la Figure VII.23, nous pouvons considérer que le rapport de bombé moyen est une mesure représentative. En effet, il varie peu d'une éprouvette à l'autre en comparaison des rapports de bombé selon les différents axes et les différentes hauteurs. Nous choisissons donc d'utiliser un même couple $(\overline{m}, \mu)$ pour l'ensemble des simulations, que l'on détermine en fonction de RB_{moyen}.

	Série B	Série C	Série D
Rh / petit axe	0.08	0.19	0.19
Rh / grand axe	0.05	0.03	0.04
Rb / petit axe	0.14	0.13	0.23
Rb / grand axe	0.11	0.07	0.05
RB_{moyen}	**0.095**	**0.105**	**0.110**

Tableau VIII.3 *Mesure des rapports de bombé expérimentaux en fonction des différentes séries d'éprouvettes pour les conditions mécaniques données en VIII.11.*

Nous déterminons le couple $(\overline{m}, \mu)$ avec des simulations de compression uniaxiale pour l'éprouvette de la série B. Nous testons les trois couples indiqués en VIII.2.1.2. Les résultats obtenus en terme de rapport de bombé moyen sont reportés Tableau VIII.4. Le couple $(\overline{m}, \mu)$ le plus adapté pour la loi de frottement utilisée est donc le couple (0.2 – 0.1), qui correspond à un rapport de bombé moyen de 0.11 alors que le bombé expérimental moyen était de 0.095.

Avant d'analyser en détail la prédiction d'anisotropie obtenue pour les simulations menées pour les différentes séries d'éprouvette, nous étudions l'influence du coefficient de frottement sur l'anisotropie. L'anisotropie est mesurée à l'aide du rapport d'ovalisation *OV* obtenu à mi-hauteur de l'éprouvette après compression et défini comme suit :

$$OV = \frac{(GA - PA)}{PA}$$

où GA représente la plus grande longueur à mi-hauteur de compression appelée Grand Axe et PA représente la plus petite longueur à mi-hauteur de compression appelée Petit Axe en référence à l'ellipse.
Le rapport d'ovalisation obtenu pour les différents couples des coefficients de frottement est reporté Tableau VIII.4. Lorsque le rapport de bombé moyen augmente, l'ovalisation diminue. Cela signifie que lorsque le frottement est important, l'ovalisation et donc l'anisotropie induite par la texture cristallographique s'estompent.

$(\overline{m}, \mu)$	(0.1 – 0.05)	(0.2 – 0.1)	(0.3 – 0.15)
RB_{moyen}	0.067	0.110	0.145
OV	0.494	0.258	0.15

Tableau VIII.4 *Rapport de bombé moyen et rapport d'ovalisation en fonction des différents couples de frottement obtenus numériquement pour la compression uniaxiale de l'éprouvette de la série B. Le rapport d'ovalisation expérimental est de 0.274.*

VIII.2.2.2 Prédiction de l'anisotropie mécanique

La prédiction de l'anisotropie mécanique est étudiée à l'aide de la mesure du rapport d'ovalisation à mi-hauteur de compression. Les résultats obtenus pour les différentes simulations sont reportés Tableau VIII.5, ainsi que les résultats expérimentaux. Les profils d'ovalisation obtenus par les différentes simulations numériques sont présentées Figure VIII.2.

Les résultats en terme de rapport d'ovalisation sont assez bien prédits pour les simulations correspondant aux séries B et D. En effet, l'erreur relative pour le rapport d'anisotropie est de 5.8% dans le cas de la série B et de 8.07% dans le cas de la série D. L'erreur sur le rapport de bombé est par ailleurs relativement raisonnable, étant donné la dispersion des valeurs expérimentales.

Pour la simulation correspondant à la série C, nous avons une erreur très importante du point de vue du rapport d'ovalisation et du rapport de bombé moyen puisqu'elle est de l'ordre de 50%. Nous avons considéré un nombre de textures plus élevé dans le maillage (82 textures) et avons obtenu le même résultat. Nous obtenons également le même résultat en utilisant la stratégie de couplage fort. Nous avons aussi essayé d'avoir un rapport de bombé plus proche du rapport de bombé expérimental (en modifiant $(\overline{m}, \mu)$) mais dans ce cas, comme nous l'avions signalé en VIII.2.2.2.1, le rapport d'ovalisation est encore moins élevé et l'erreur sur ce rapport augmente donc. L'explication la plus vraisemblable est celle d'un aspect expérimental qui n'a pas été pris en compte numériquement. En effet, on constate que la dimension du petit axe de l'ellipse associée à la section de l'éprouvette est bien prédite, alors que celle du grand axe ne l'est pas du tout. Le frottement pourrait avoir été « quasi-glissant » dans cette direction, expérimentalement. Mais dans ce cas, le bombé aurait diminué expérimentalement, ce qui n'est pas le cas. On remarque que les éprouvettes C ont le sens long des grains parallèle à l'axe de compression. Des phénomènes de flambage de grains sont donc envisageables.

	Grand Axe à mi-hauteur (mm)	Petit Axe à mi-hauteur (mm)	Rapport d'ovalisation à mi-hauteur ((GA-PA)/PA)	Rapport de bombé moyen
Expérimental	79	62	0.274	0.095
Numérique (0.2 - 0.01)	75.3	59.8	0.258	0.110
Erreur relative en %	4.9	3.5	5.8	15.7

a) **Série B**

	Grand axe à mi-hauteur (mm)	Petit Axe à mi-hauteur (mm)	Rapport d'ovalisation à mi-hauteur ((GA-PA)/PA)	Rapport de bombé moyen
Expérimental	60	45.5	0.318	0.105
Numérique (0.2 - 0.1)	51.72	45.13	0.146	0.055
Erreur relative en %	13.8	0.81	54.08	47.62

b) **Série C**

	Grand axe (GA) à mi-hauteur (mm)	Petit axe (PA) à mi-hauteur (mm)	Rapport d'ovalisation à mi-hauteur ((GA-PA)/PA)	Rapport de bombé moyen
Expérimental	54	38	0.421	0.110
Numérique (0.2 - 0.1)	52.36	37.74	0.387	0.09
Erreur relative en %	3.03	0.68	8.07	18.18

c) **Série D**

Tableau VIII.5 *Tableau récapitulatif des résultats obtenus en terme d'anisotropie et de frottement pour les différentes séries dans le cas expérimental et dans le cas numérique. L'erreur relative en % est l'erreur obtenue entre la simulation et l'expérience pour les différentes grandeurs étudiées.*

VIII.2.3 Temps de calcul des simulations

A titre informatif, nous avons répertorié au Tableau VIII.6 le temps de calcul des différentes simulations.

Dans le cas de compression de l'éprouvette issue de la série :

- B, nous avons 52 textures et 257 incréments de calcul,
- C, nous avons 30 textures et 187 incréments de calcul,
- D, nous avons 30 textures et 167 incréments de calcul.

Le nombre d'incréments de calcul varie d'une simulation à l'autre dans la mesure où les vitesses de presse sont différentes d'une simulation à l'autre (cf. équations VIII.11) et que le pas de temps est constant pour toutes les simulations.

En comparant le temps de calcul des simulations, nous voyons donc que ce dernier augmente avec le nombre d'orientations dans le maillage EF et le nombre d'incréments de calcul.

VIII.2.4 Discussion

Au vu des simulations réalisées sur l'URB66 brut de solidification, nous pouvons conclure que le couplage du modèle polycristallin et de Forge3® est valide puisque nous avons pu prédire l'évolution de l'anisotropie pour 2 essais sur 3.

Concernant la physique du matériau, il n'était pas nécessaire pour les éprouvettes B et D de prendre en compte la composition chimique et la microstructure, l'anisotropie étant principalement induite par la texture cristallographique.

Pour expliquer les erreurs persistantes des simulations concernant la série C, on remarque que le sens de compression du cylindre est quasiment parallèle au sens long des grains colonnaires. On peut envisager que cela provoque un « flambage » des grains, induisant des localisations de déformation et une anisotropie mécanique non prédictibles par des simulations répartissant la texture totale dans toute la pièce. Il faudrait donc peut-être dans ce cas un modèle qui tienne compte de la forme des grains, avec des simulations où les grains seraient maillés explicitement.

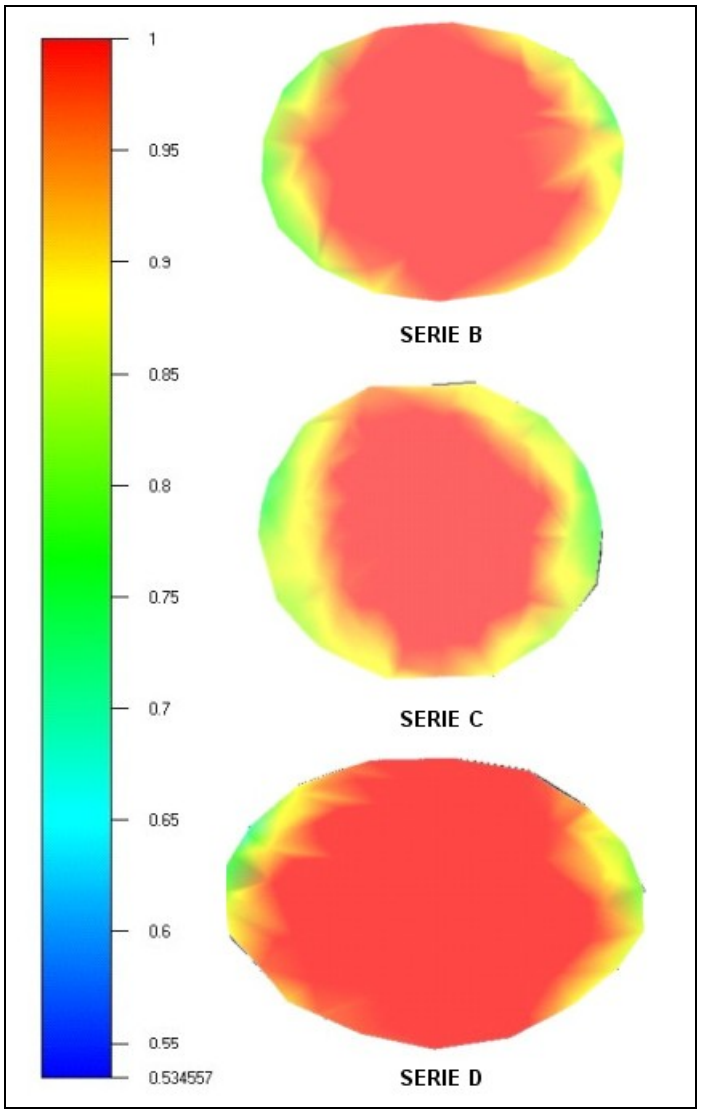


Figure VIII.2 *Résultats des simulations : profils d'ovalisation des éprouvettes à mi-hauteur après compression pour les différentes séries.*

	Série B	Série C	Série D
Temps CPU Couplage faible	1h17min	51min	27min

Tableau VIII.6 *Temps CPU des simulations avec couplage faible avec un Pentium IV 1.8 GHz.*

VIII.3 Validation du transport des variables polycristallines lors du remaillage : écrasement sur génératrice de l'AA7175 filé

Nous présentons la validation de la stratégie de transport des variables polycristallines lors du remaillage à l'aide de l'écrasement sur génératrice de l'AA7175 filé. La stratégie de transport utilisée est la méthode 2B exposée au chapitre VI section VI.2.2.2. Nous utilisons le couplage faible pour le calcul de la rhéologie sur les EFs (excepté pour l'incrément qui succède le remaillage, pour lequel le couplage fort est utilisé).

Nous allons comparer aux expériences (cf. VII.2.2.3) les résultats des simulations obtenus :

- avec la loi de comportement rhéologique polycristalline,
- avec une loi de comportement rhéologique isotrope.

Dans le cas où la rhéologie polycristalline est utilisée, nous discutons les résultats obtenus en terme de prédiction de texture et d'anisotropie lorsque une seule particule est positionnée dans le maillage, et lorsque plusieurs particules sont positionnées dans le maillage.

VIII.3.1 Présentation des simulations

Nous avons simulé les deux essais expérimentaux suivants :

- $T = 380°C,\ v = 15mm.s^{-1},\ \varepsilon = 0.9$ dans le cas de l'éprouvette lubrifiée,
- $T = 380°C,\ v = 15mm.s^{-1},\ \varepsilon = 0.5$ dans le cas de l'éprouvette non lubrifiée,

où l'axe d'écrasement du cylindre est l'axe y (Figure VIII.3).

Les paramètres fixes pour l'ensemble des simulations réalisées sur ces deux essais sont :

- le maillage

Le maillage représente uniquement le maillage de 1/8 du cylindre initial. En effet, compte tenu des symétries des figures de pôle (Figure VII.9), nous pouvons considérer les 3 plans de symétries suivants :

- 1 symétrie par rapport au sens du filage, le plan xy au niveau z = 0,
- 2 symétries qui consistent à considérer un quart de cylindre de par la symétrie orthotrope du problème, soit les plans yz et xz.

Le maillage du lopin est représenté par 3346 EF tétraédriques (Figure VIII.3).

- les conditions opératoires

Les conditions opératoires sont les mêmes que celles des essais expérimentaux. La loi de frottement utilisée est une loi de type Coulomb limité Tresca. Les coefficients de frottement ont été donnés par Manoir Industries. Pour l'essai concernant l'éprouvette lubrifiée, les coefficients de frottement utilisés sont $(\overline{m},\ \mu)$ = (0.2, 0.1) alors que pour l'essai concernant l'éprouvette non lubrifiée, les coefficients de frottement sont $(\overline{m},\ \mu)$ = (0.8, 0.4).

- la période de remaillage lors des simulations

Lors de ces simulations (vitesse de presse constante égale à $15\,mm.s^{-1}$), le contrôle de la presse se fait à pas de temps constant égal à $0.01s$. Le remaillage est imposé de façon périodique tous les 20 incréments. Dans le cas de l'essai où la déformation finale est de 0.9 (soit 142 incréments de calcul), le nombre total de remaillages est donc de 7 alors que dans le cas où la déformation finale est de 0.5 (soit 90 incréments de calcul), le nombre total de remaillages est de 4.

Le paramètre variable pour l'ensemble des simulations est la loi de comportement utilisée :

- rhéologie isotrope.

La loi de comportement isotrope ainsi que les paramètres de cette loi ont été déterminés par Rajeev Gupta dans le cadre de son stage mené en collaboration avec le CEMEF et Manoir Industries.

- rhéologie polycristalline.

Dans le cas où la rhéologie polycristalline est utilisée

Les paramètres identiques pour l'ensemble des simulations sont :

- les paramètres de la loi polycristalline répertoriés Tableau VIII.7. La valeur des contraintes dans le cas polycristallin est la même que dans le cas isotrope.
- la texture initiale réprésentée par un ensemble de 1000 orientations cristallographiques. Les figures de pôles {111} et {100} de la texture initiale sont représentées Figure VII.9.

Le paramètre variable est le nombre de particules dans le maillage EF.

Nous étudions les résultats obtenus si nous plaçons 1 ou 63 particules dans le maillage. Lorsque 63 particules sont positionnées dans le maillage EF, les particules sont distribuées dans le maillage de telle sorte que le volume de la cellule associée soit homogène (Figure VIII.3). Pour ces deux nombres de particules considérés, nous distribuons 63 textures dans le maillage EF afin que l'écart type des erreurs d'arrondi dans la méthode de distribution soit suffisant petit.

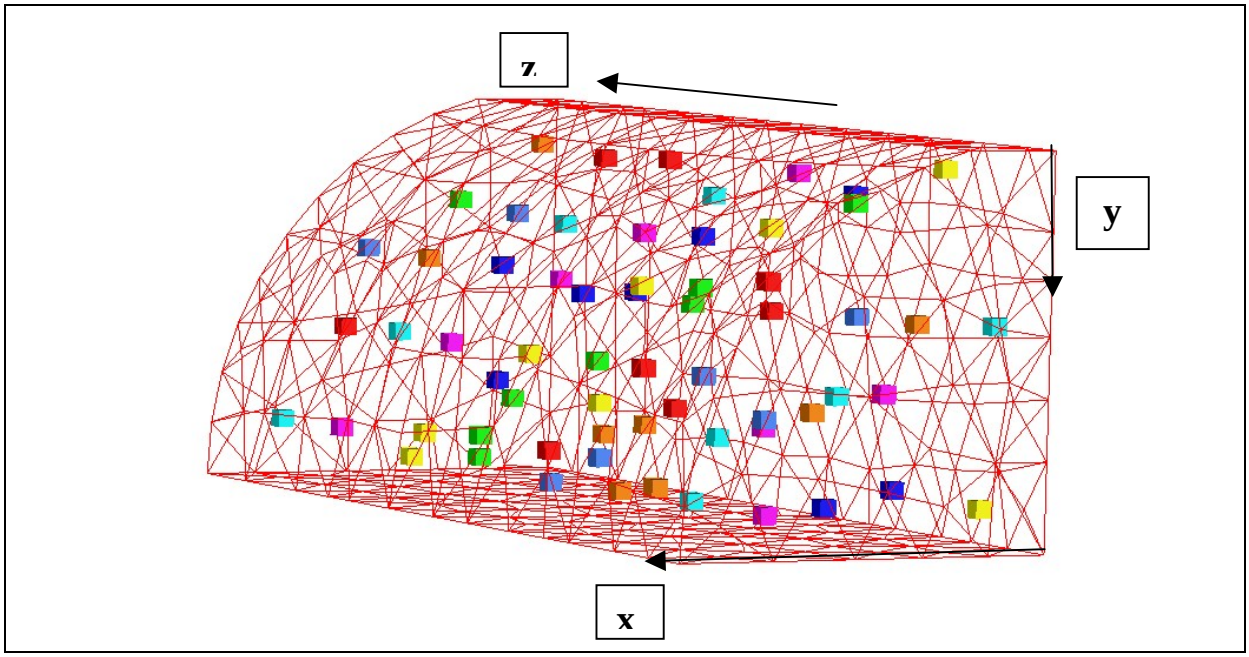


Figure VIII.3 *Maillage initial de l'AA7175 filé avec la position des 63 particules où l'axe y représente l'axe de compression.*

n	τ_{c0} (MPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
7.0	30.0	107.3	60.9	28.3

Tableau VIII.7 *Paramètres de la loi polycristalline pour l'AA7175 filé.*

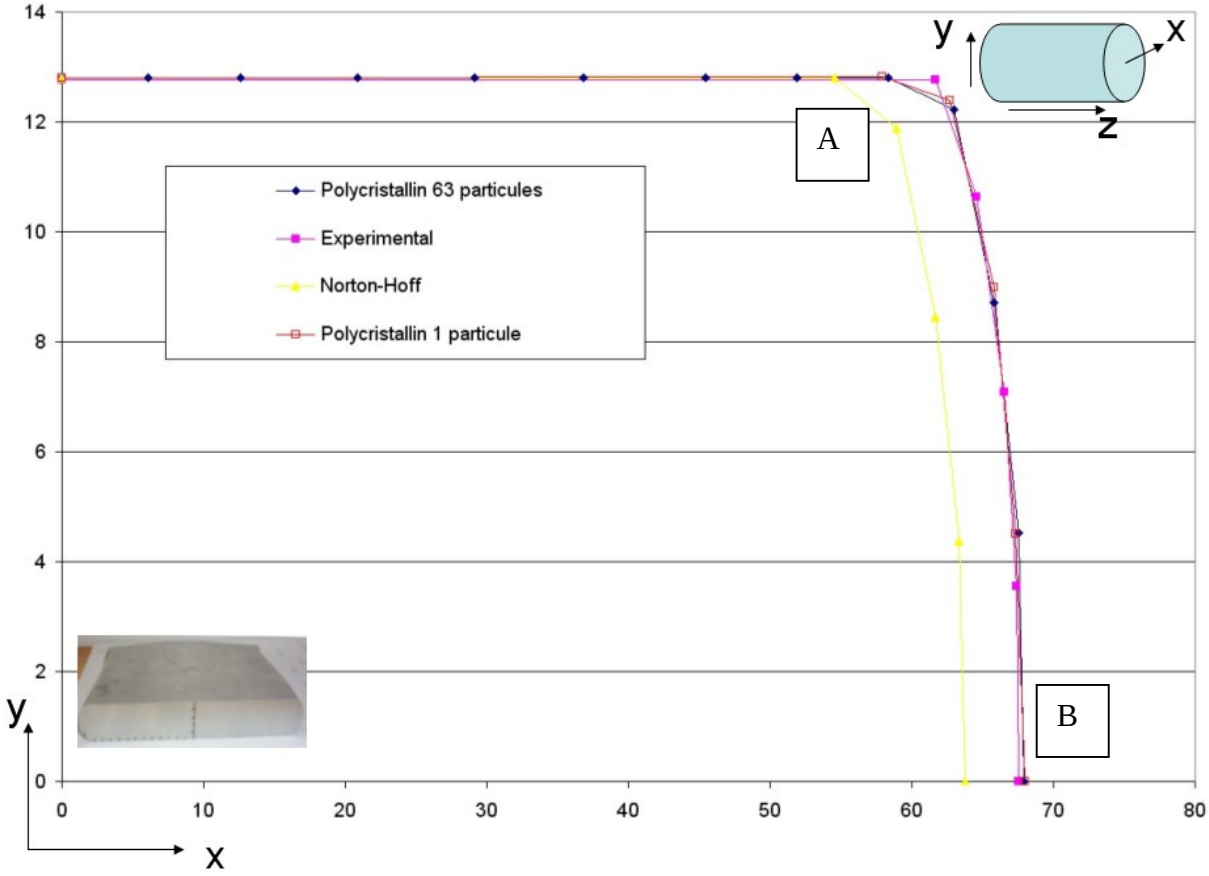
VIII.3.2 Résultats des simulations en terme de prédiction d'anisotropie mécanique et d'évolution de texture cristallographique

Nous présentons pour ces deux essais les résultats obtenus en terme de prédiction d'anisotropie et les comparons aux résultats expérimentaux. Dans le cas de l'éprouvette lubrifiée, nous analysons aussi les résultats obtenus en terme d'évolution de texture cristallographique.

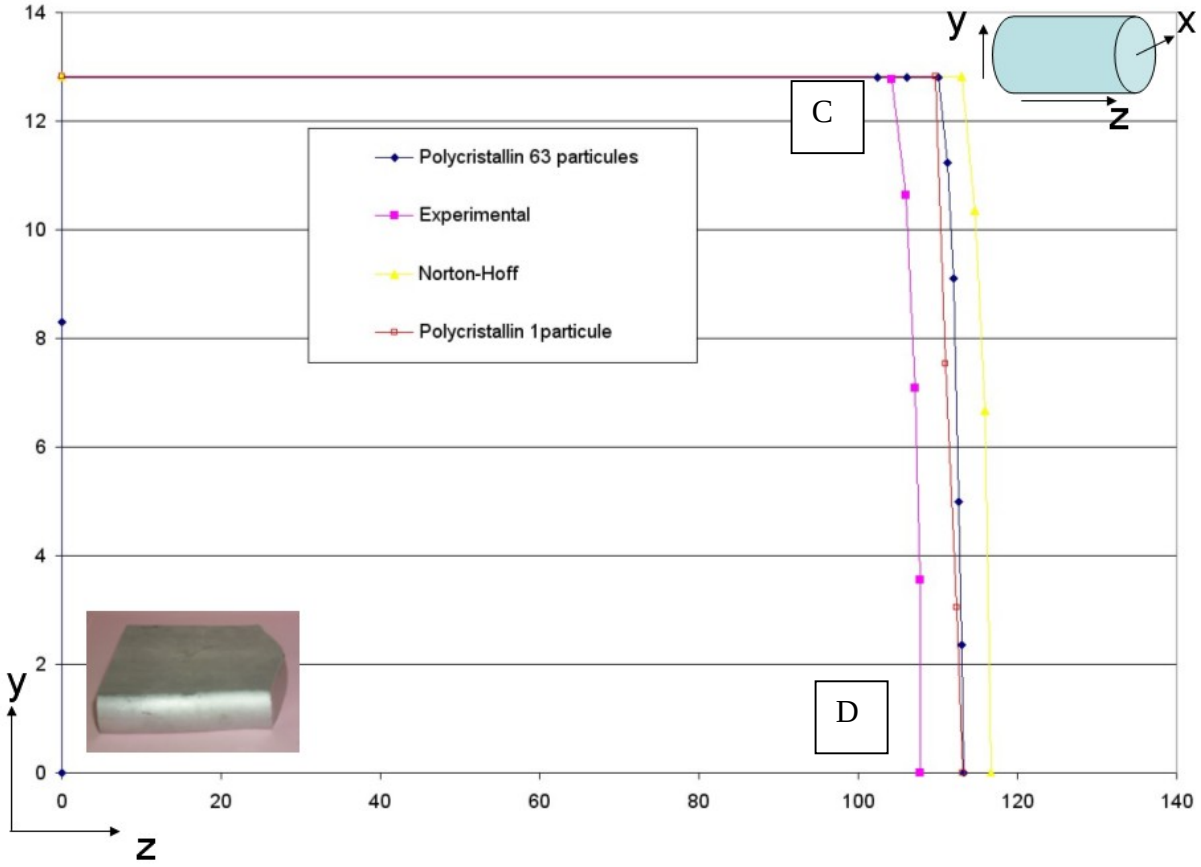
Pour étudier la prédiction d'anisotropie, nous comparons les différents profils de l'éprouvette après compression aux profils obtenus expérimentalement dans le cas correspondant 1) à l'éprouvette lubrifiée et, 2) à l'éprouvette non lubrifiée.

VIII.3.2.1 Eprouvette lubrifiée

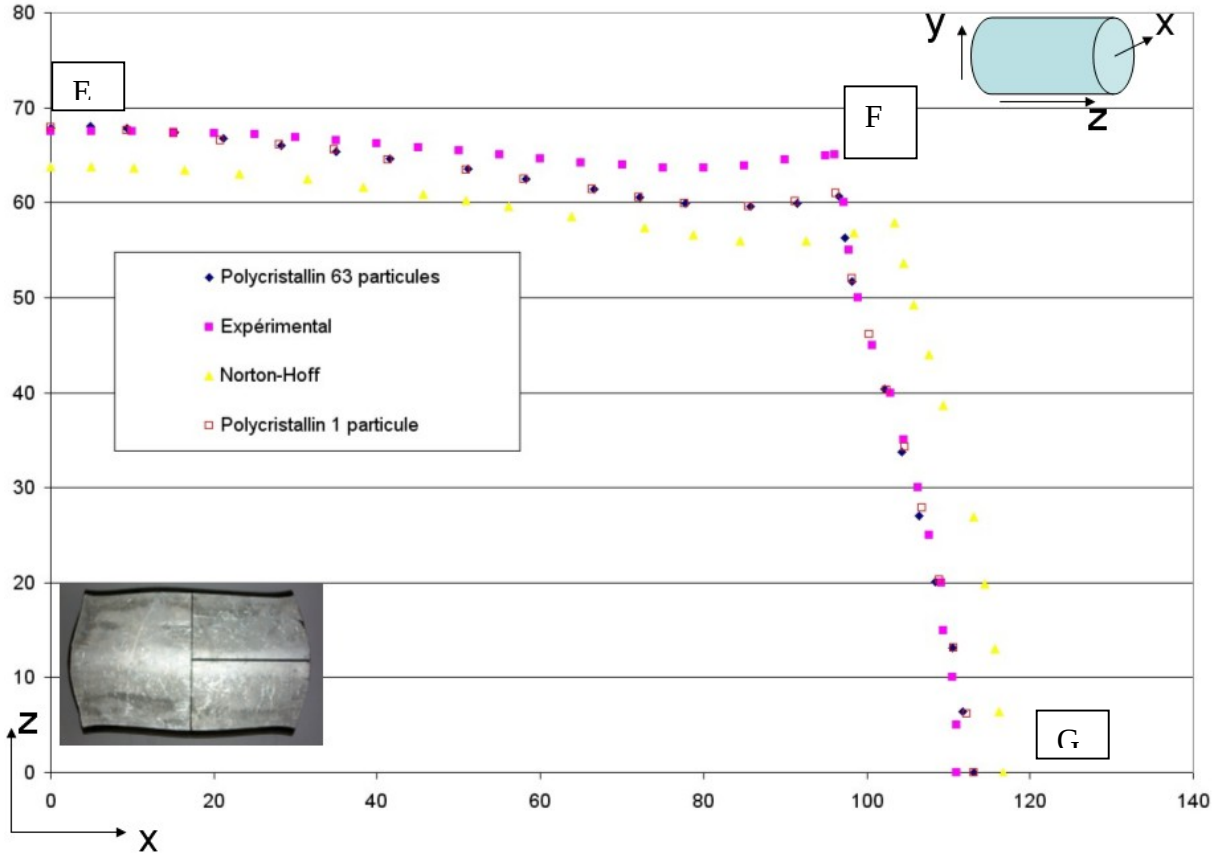
Les profils obtenus selon différents plans de coupe sont représentés Figure VIII.4. Sur l'ensemble des profils, quel que soit le nombre de particules utilisé dans le maillage, la rhéologie polycristalline permet d'obtenir un profil d'écoulement plus proche de l'expérience que dans le cas de la rhéologie isotrope. L'anisotropie est donc bien liée à la texture cristallographique et son évolution pour autant que la contribution du frottement soit la même.



a) Profil d'une coupe selon (x,y).



b) Profil d'une coupe selon (y,z).



c) Profil d'une coupe selon (x,z).

Figure VIII.4 *Profils selon différents plan de coupe après compression à* $T = 380°C$, $v = 15mm.s^{-1}$, $\varepsilon = 0.9$ *de l'éprouvette lubrifié. Les dimensions sont en mm. Comparaison de l'expérience et des simulations avec la loi de type Norton-Hoff et la rhéologie polycristalline avec 1 et 63 particules.*

Nous analysons l'écart de prédiction d'allongement pour différentes zones des profils notées A,B,C,D,E,F,G et indexées Figure VIII.4. Les erreurs relatives des allongements par rapport aux allongements expérimentaux sont reportées dans le Tableau VIII.8. Nous ne discernons pas le cas à une particule du cas à 63 particules dans la mesure où les profils obtenus dans ces deux cas sont quasiment identiques. Nous utilisons le nom de rhéologie polycristalline pour les désigner. L'analyse des erreurs relatives montre que nous avons une erreur relative maximale de 6.7% dans le cas de la rhéologique polycristalline alors que pour le modèle de rhéologie isotrope, nous atteignons un maximum de 10.86%. Si nous faisons la moyenne des erreurs relatives sur ces différentes zones, nous avons une erreur relative moyenne de 3.3% dans le cas de la rhéologie anisotrope contre une erreur de 7.84% dans le cas de la rhéologie isotrope.

Zones	A	B	C	D	E	F	G
Rhéologie polycristalline	-5.4	0.7	5.5	5	0.5	0.6 (x) -6.7 (y)	1.8
Rhéologie isotrope	-11.5	-5.6	8.4	8.2	-5.5	7.6 (x) -10.86 (y)	5.1

Tableau VIII.8 *Erreurs relatives (en %) des allongements obtenus par la simulation numérique par rapport aux allongements expérimentaux selon différentes zones de la pièce indexées Figure VIII.4.*

Utiliser la rhéologie polycristalline permet donc de mieux prédire le comportement du matériau et permet de réduire l'erreur d'un facteur supérieur à 2.

L'erreur relative moyenne de 3.3% obtenue dans le cas de la rhéologie polycristalline permet de valider par l'expérience la mise en place du transport des variables polycristallines dans Forge3® à l'aide de la méthode 2B.

Examinons la prédiction de l'évolution de la texture cristallographique. Elle a été mesurée expérimentalement sur 2 zones : une zone très déformée notée zone1 et une zone moins déformée notée zone2 comme indiqué Figure VII.26. Ces zones étant repérées spatialement dans l'éprouvette, nous analysons la texture cristallographique obtenue numériquement dans ces zones, en distinguant les cas avec 1 et 63 particules. Les Figures de pôle obtenues sur les différentes zones sont représentées Figure VIII.5 en fonction du nombre de particules considéré dans le maillage EF.

Dans le cas de la simulation avec une seule particule dans le maillage, les figures de pôle de la zone peu déformée et de la zone très déformée sont très semblables. Dans le cas de la simulation avec 63 particules dans le maillage, les figures de pôle obtenues sur les deux zones sont différentes. Cette différence est évidemment due à la redistribution des orientations dans les cellules au cours du remaillage.

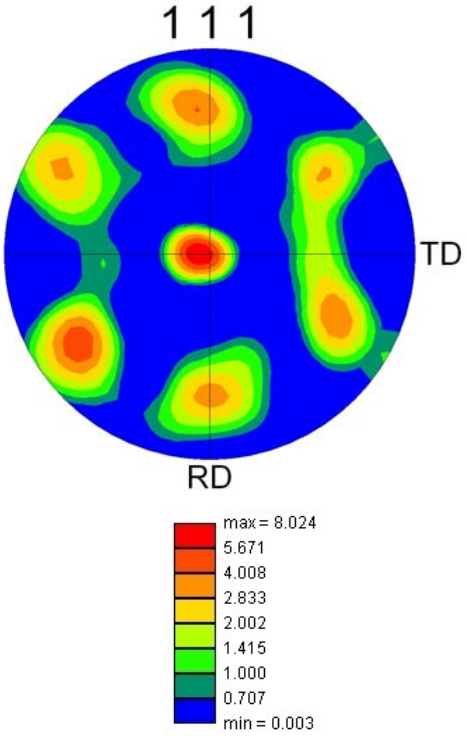
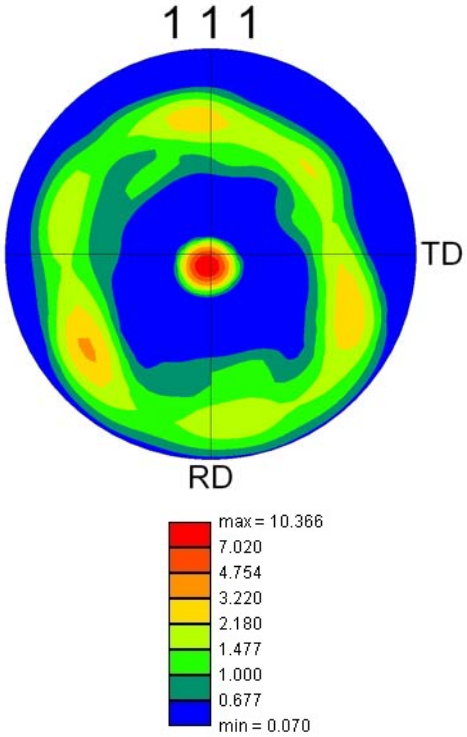
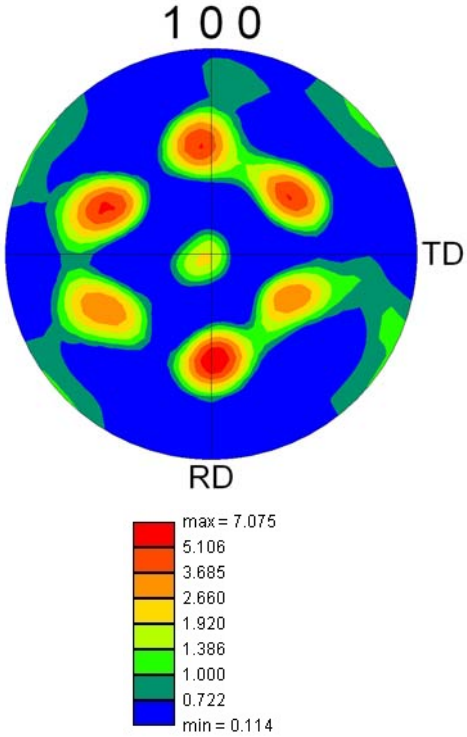
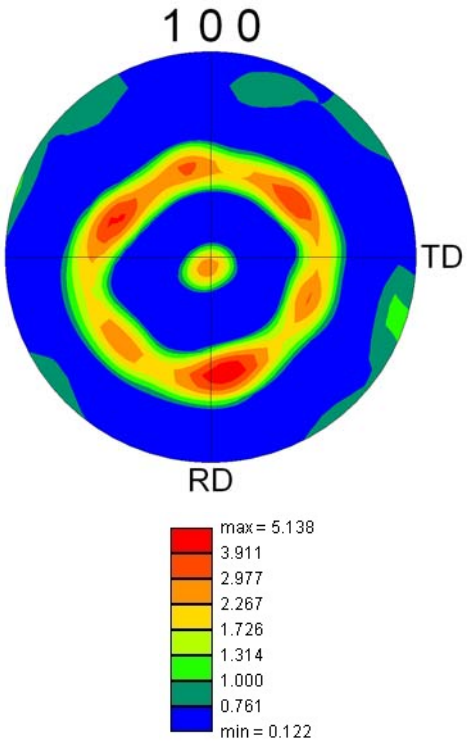
Dans la zone peu déformée, les figures de pôle de la zone obtenues avec 63 particules sont assez proches de la texture initiale de l'AA7175 filé (cf. Figure VII.9). Dans la zone très déformée, les figures de pôle obtenues pour les deux nombres de particules sont relativement semblables.

Comparons l'évolution de texture obtenue à l'aide de ces deux simulations (Figure VIII.5) à l'évolution de texture mesurée expérimentalement (Figure VII.27 et VII.28).

Dans la zone très déformée, les figures de pôle obtenues sont très proches de celles obtenues expérimentalement.

Dans la zone peu déformée, la simulation avec une seule particule donne de mauvais résultats à cause du mélange des textures lors du remaillage. Les différences obtenues entre l'expérience et la simulation avec 63 particules sont de même nature que celles obtenues entre la texture de la zone peu déformée mesurée expérimentalement (Figure VII.27) et la texture initiale mesurée expérimentalement (Figure VII.9). Le nombre de points de mesure n'a peut être pas été suffisant pour la Figure VII.27 (il était deux fois moindre par rapport à la Figure VII.9). Cette interprétation est encouragée par le résultat numérique.

Quoiqu'il en soit, il est certain que la simulation à 63 particules saisit relativement bien les gradients de texture existant dans la pièce, ce qui n'est pas le cas de la simulation à une particule. Les temps de calcul sont par ailleurs similaires (cf . Tableau VIII.10). L'étude de l'évolution de la texture cristallographique montre donc l'intérêt de considérer plusieurs particules dans le maillage lors de simulations de procédés de mise en forme nécessitant le remaillage. Elle permet aussi de valider les conclusions relatives à l'étude numérique du transport des variables polycristallines faites au chapitre précédent ainsi que la stratégie de transport des variables polycristalline lors du remaillage.

Cas avec une particule, zone peu déformée Zone 2 (cf. Figure VII.26)	**Cas avec 63 particules, zone peu déformée Zone 2 (cf. VII.24)**
	
	

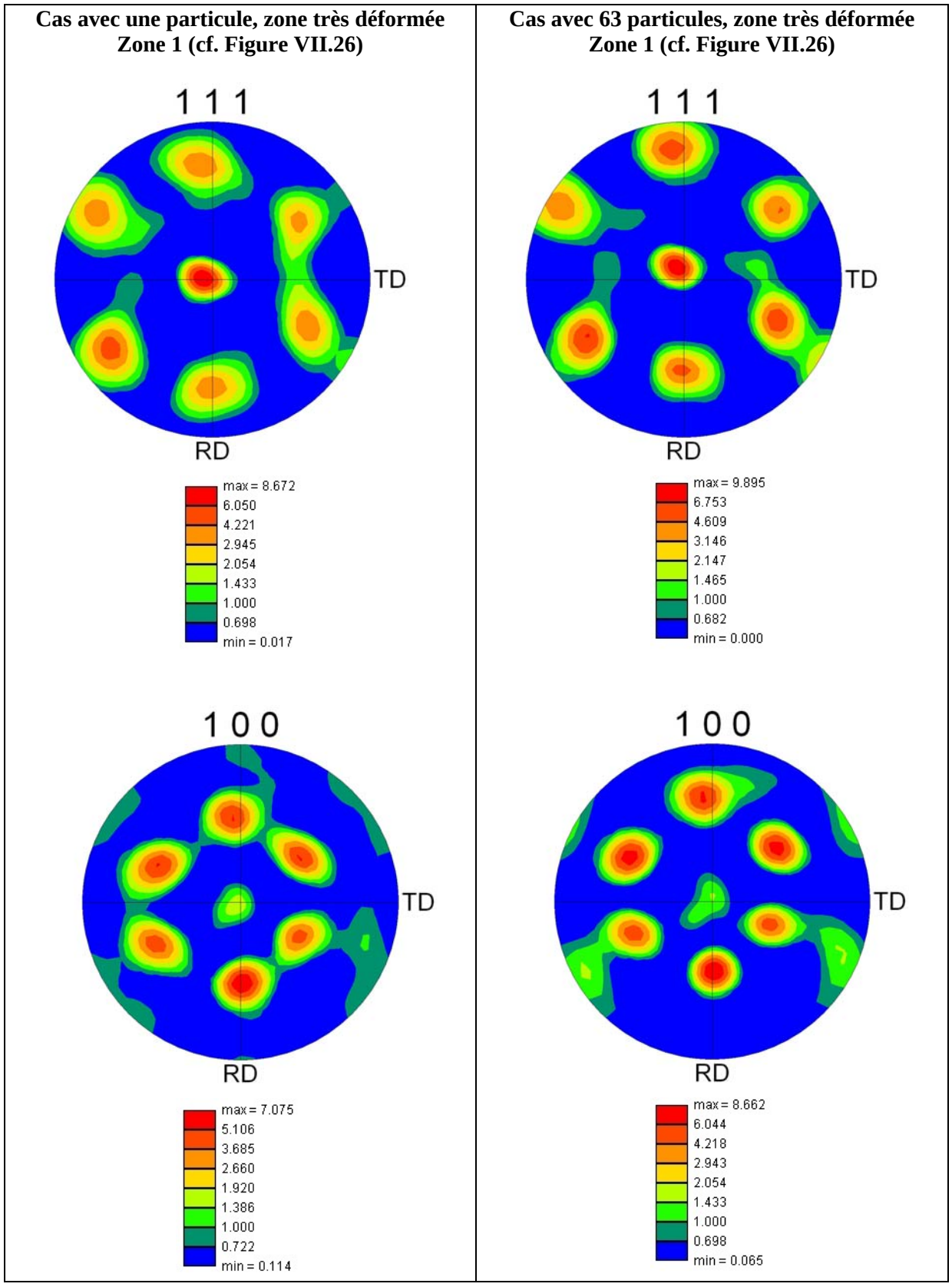


Figure VIII.5 *Figures de pôle {111} et {100} obtenues numériquement dans la zone très déformée et la zone peu déformée. Comparaison des cas avec une seule particule et 63 particules dans le maillage EF. ND est l'axe z, RD l'axe x et TD l'axe y.*

VIII.3.2.2 Eprouvette non lubrifiée

Etudions le cas de l'éprouvette non lubrifiée en terme de prédiction d'anisotropie en comparant les profils obtenus selon différentes coupes pour les simulations utilisant la loi de comportement isotrope appelée ici Norton-Hoff et la loi rhéologique polycristalline qui a été menée avec 63 particules dans le maillage.

Nous ne montrons Figure VIII.6 que le profil de la coupe selon le plan (x,z), ce plan étant celui où nous obtenons les plus mauvaises prédictions d'anisotropie.

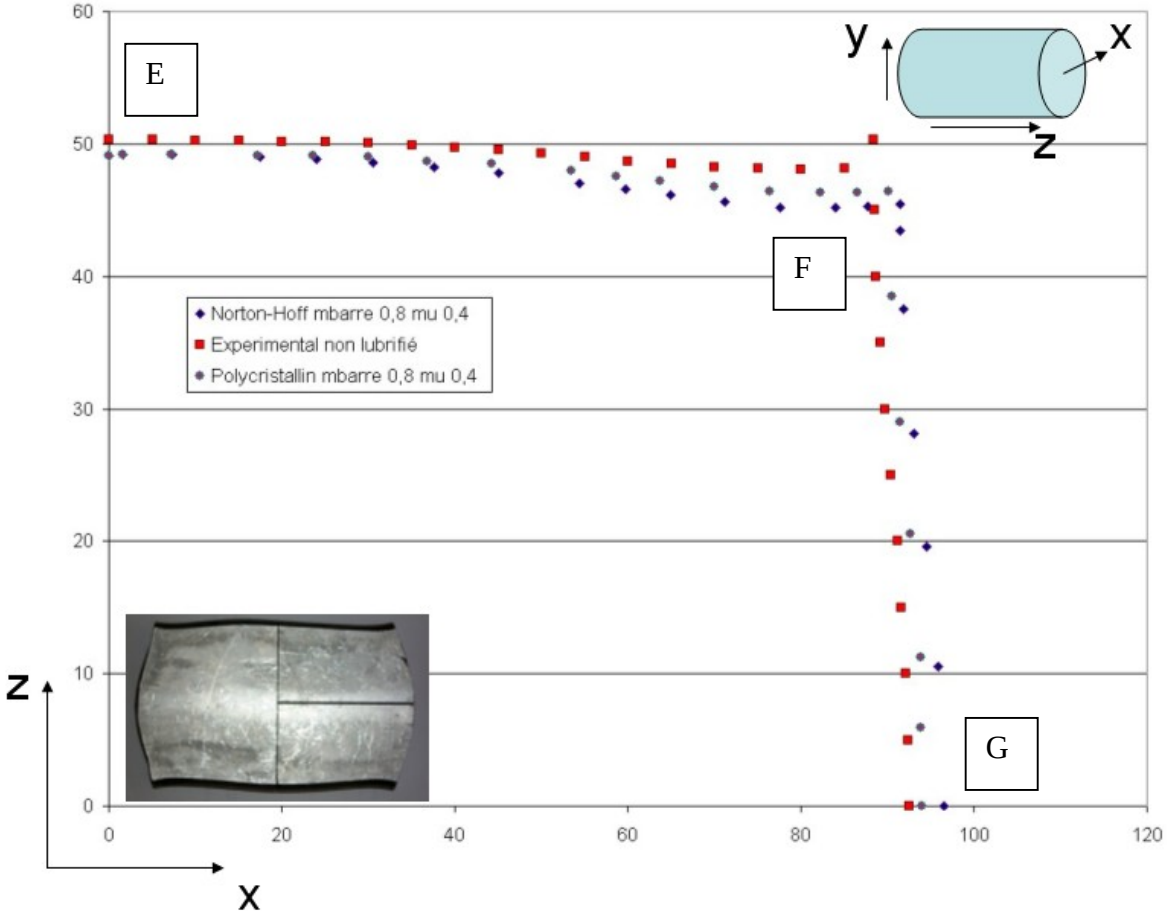


Figure VIII.6 *Profil d'une coupe selon (x,z) après compression à* $T = 380°C$, $v = 15mm.s^{-1}$, $\varepsilon = 0.5$ *de l'éprouvette non lubrifié. Les dimensions sont en mm. Comparaison de l'expérience et des simulations avec la loi de type Norton-Hoff et polycristalline avec 63 particules.*

Les erreurs relatives obtenues dans les différentes zones A,B,C,D,E,F,G sont données Tableau III.9 . Ces zones représentent les mêmes points matériels que ceux indexés Figure VIII.4. Les erreurs relatives sont très proches pour la rhéologie polycristalline et pour la rhéologie isotrope. Elles ne dépassent pas les 10% quel que soit la rhéologie utilisée. L'erreur relative moyenne est de 2.3% dans le cas de la rhéologie polycristalline et de 2.9% dans le cas de la rhéologie isotrope.

Les résultats soulignent encore une fois le fait que le frottement gomme les effets de l'anisotropie liés à la texture cristallographique.

Les résultats concernant la prédiction d'anisotropie mécanique permettent à nouveau de valider expérimentalement la stratégie de transport des variables polycristallines lors du remaillage mise en place dans Forge3®.

Zones	A	B	C	D	E	F	G
Rhéologie polycristalline	1.3	2.4	0	3.1	2.3	0.8 (x) -7.7 (y)	1
Rhéologie isotrope	1.3	2.4	0	3.1	2.3	0.22 (x) -9.7 (y)	4

Tableau VIII.9 *Erreurs relatives (en %) des allongements obtenus par la simulation numérique par rapport aux allongements expérimentaux selon différentes zones de la pièce indexées Figure VIII.4.*

VIII.3.3 Temps de calcul des simulations

A titre indicatif, nous avons reporté Tableau VIII.10 le temps de calcul des simulations dans le cas de l'éprouvette lubrifiée en fonction de la rhéologie utilisée. Il est évident que le temps de calcul des simulations polycristallines est encore très élevé en comparaison de celui pour une loi de comportement isotrope.

Néanmoins ces temps de calcul restent raisonnables par rapport aux temps de calcul obtenus lors de simulations avec la rhéologie polycristalline, le couplage fort et une texture par EF.

Simulations	Rhéologie isotrope + remaillage	Rhéologie polycristalline 63 particules Couplage faible + remaillage
Temps de calcul (min)	2 min	83 min

Tableau VIII.10 *Temps de calcul des simulations l'éprouvette non lubrifiée en fonction de la rhéologie utilisée avec un Pentium IV 2.4 GHz.*

VIII.3.4 Conclusion

Au vu des résultats concernant l'AA7175 filé, la stratégie de transport des variables polycristallines que nous avons mise en place (méthode 2B) permet de prédire correctement l'anisotropie mécanique ainsi que l'évolution de texture cristallographique dans le cas où un nombre suffisant de particules est positionné dans le maillage EF. De plus, le fait de placer des textures partielles sur les EFs permet de réduire significativement le temps de calcul des simulations.

Conclusion

La mise en place dans Forge3® d'une rhéologié élasto-viscoplastique polycristalline, et de son couplage avec la méthode de distribution des orientations, a été validée à l'aide des expériences réalisées sur l'URB66 brut de solidification.

Nous avons aussi montré que la principale cause de l'anisotropie lors de la déformation de ces structures brutes de solidification à chaud est la texture cristallographique, excepté dans le cas particulier où la sollicitation est parallèle au sens long des grains (éprouvette C).

Pour le cas de l'éprouvette issue de la série C, des vérifications restent à mener afin de comprendre pourquoi la simulation ne donne pas des résultats corrects en terme de prédiction d'anisotropie. On pourrait effectuer des simulations avec un maillage des grains pour évaluer l'influence de la forme des grains et la localisation de la déformation.

La stratégie de transport des variables polycristallines a été validée ainsi que son implémentation dans Forge3® à l'aide des essais sur l'AA7175 filé.

Dans les différentes simulations, nous avons vu que nous pouvions obtenir des temps de calcul raisonnables (toujours nettement supérieurs bien sûr au temps de calcul d'une rhéologie isotrope) en utilisant la méthode de distribution des orientations d'une part, et la stratégie de couplage faible d'autre part.

Références bibliographiques

[CAI 1994] D. Caillet, Rhéologie : essais mécaniques d'identification du comportement, In : Séminaire de plasticité Eléments finis et mise en forme des métaux, Tome1, Sophia-Antipolis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, CEMEF, chap. 3, 26-30 septembre 1994.

[HOS 1993] W.F. Hosford, The mechanics of crystals and textured polycrystals, Eds. Oxford Science Publications, 1993.

[KOC 1998] U.F. Kocks, C.N. Tomé and H.R. Wenk, Texture and anisotropy, Cambridge University Press, 1998.

[MON 1994] P. Montmitonnet, Lois de frottement et mesure du frottement, Séminaire de plasticité Eléments finis et mise en forme des métaux, Tome1, Sophia-Antipolis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, CEMEF, chap. 4, 26-30 septembre 1994.

Chapitre IX

Conclusion et perspectives

Dans cette étude, nous avons développé un modèle qui permet de prédire l'anisotropie mécanique induite par la texture cristallographique ainsi que l'évolution de la texture cristallographique lors de simulations de procédés de mise en forme en grande déformation.

Notre travail se situe dans un contexte plus général qui est celui d'intégrer dans un code de calcul EF des lois de comportements rhéologiques capables de prendre en compte l'évolution des données microstructurales du matériau, et de transporter ces données microstructurales lors du remaillage. Nous avons choisi pour traiter ce type de problématique d'utiliser le concept des particules Lagrangiennes. Les particules Lagrangiennes positionnées dans un maillage EF permettent de localiser les informations microstructurales sur différentes zones du maillage. De plus, le fait qu'elles se déplacent avec le maillage au cours de la déformation permet de prendre en compte le transport des données microstructurales lors du remaillage de manière aisée. Nous avons utilisé le concept des particules Lagrangiennes dans le cadre de l'évolution de données microstructurales représentées par les orientations cristallographiques, les contraintes cristallines, les cissions critiques qui sont les données microstructurales dont on veut suivre l'évolution lorsque l'on traite de l'anisotropie de matériaux polycristallins.

1. D'un point de vue numérique

Notre objectif est de prévoir l'anisotropie induite par la microstructure du métal lors de simulations de procédés de mise en forme à chaud. Pour atteindre cet objectif, nous avons adopté un couplage physique afin de rendre compte au mieux du comportement du matériau au cours de la déformation. D'un point de vue numérique, notre travail s'est effectué suivant les étapes énumérées suivantes :

Nous avons intégré dans Forge3® un modèle capable de prédire l'anisotropie induite par la texture cristallographique du matériau. Notre choix s'est porté sur un modèle polycristallin élasto-viscoplastique de type Taylor [DEL 2006]. Ce type de modèle permet notamment de prédire raisonnablement bien l'anisotropie dans le cas des matériaux à structure Cubique Faces Centrées, structure cristalline correspondant aux matériaux de notre étude.

Nous avons développé deux types de couplage : le couplage fort pour lequel les données microstructurales évoluent en même temps que les données mécaniques et le couplage faible pour lequel la résolution mécanique n'est pas exactement en phase avec l'évolution des données microstructurales.

Au vu du temps de calcul des simulations, nous avons proposé d'utiliser le concept des particules Lagrangiennes afin de le réduire. Les particules Lagrangiennes permettent de considérer en chaque point d'intégration du maillage EF des microstructures partielles au lieu de microstructures entières. Nous avons vu que pour distribuer des microstructures partielles sur les points d'intégration du maillage EF et conserver une bonne représentation globale de ces microstructures vis-à-vis du calcul du comportement mécanique de l'ensemble de la pièce, il était nécessaire d'utiliser une distribution qui tienne compte du volume des éléments. L'utilisation d'une telle méthode génère des erreurs d'arrondi plus ou moins importantes selon la disparité des volumes associés aux points d'intégration du maillage EF, et le nombre total de microstructures représentatives distribuées dans le maillage EF. Nous avons vu que lorsque l'erreur d'arrondi était importante, cela engendrait des erreurs sur la prédiction d'anisotropie. Il faut donc trouver un compromis entre :

- distribuer beaucoup de microstructures et avoir des temps de calcul très élevés
- distribuer peu de microstructures et avoir des prédictions d'anisotropie moins précises.

Il est donc nécessaire de distribuer un nombre suffisant de textures dans le maillage. Une fois ce nombre de textures fixé, le paramètre qui permet de contrôler l'erreur commise lors de la méthode de distribution est l'écart-type relatif du poids des orientations de la texture représentative dans le maillage EF.

Cette méthode a aussi été introduite par L. Delannay dans le code de calcul Abaqus et a donné des résultats satisfaisants dans le cadre de simulations d'emboutissage [DEL 2005]. L. Delannay n'a pas utilisé de particules Lagrangiennes mais la méthode de distribution selon le volume sur l'ensemble du maillage, c'est-à-dire l'équivalent d'une seule particule positionnée dans le maillage EF.

Nous avons ensuite mis en place une stratégie pour le transport des variables polycristallines lors du remaillage. Cette stratégie utilise à nouveau le concept des particules Lagrangiennes : les particules sont des marqueurs définissant des cellules, qui permettent de localiser l'information microstructurale sur une zone du maillage. Lors du remaillage, cette information microstructurale est distribuée sur les nouvelles cellules du maillage. Nous avons vu qu'il était nécessaire de considérer un certain nombre de particules dans le maillage afin que, lors du remaillage, les informations concernant les données microstructurales soient redistribuées dans des zones bien localisées et quasi-homogènes en déformation.

Enfin, nous avons validé les différents développements à l'aide de comparaisons avec des expériences, expériences que nous avons réalisées au cours de ce travail de thèse.

2. D'un point de vue expérimental

D'un point de vue expérimental, nous avons étudié une structure brute de solidification à microstructure intra-granulaire dendritique. Au début de notre étude de la microstructure à l'état initial, nous avons pensé que la différence de composition chimique entre les dendrites et les parties interdendritiques ainsi que la forme des dendrites étaient des facteurs qui pouvaient influencer notablement la prédiction d'anisotropie mécanique. Cependant, nous avons vu lors des simulations que le facteur primordial pour prédire l'anisotropie mécanique lors de la mise en forme des structures brutes de solidification est la texture cristallographique, mais aussi que la forme des grains semblait jouer un rôle dans certains cas particuliers.

3. Perspectives

Malgré tout, d'un point de vue numérique, il reste certains points à améliorer concernant le modèle mis en place, la méthode de distribution des orientations, ainsi que le modèle de transport des variables polycristallines lors du remaillage.

3.1 Simulation de l'éprouvette de la série C (chapitre VIII section VIII.2)

Concernant l'URB66 brut de solidification, il serait intéressant de comprendre pourquoi la simulation de l'éprouvette de la série C mène à des résultats erronés en terme de prédiction d'anisotropie. Les pistes à suivre semblent être les suivantes :

Dans un premier temps, il serait possible de positionner des particules dans le maillage EF de telle sorte que les cellules définies par ces particules permettent de représenter la forme des différents grains. Ensuite, comme il est possible de considérer des textures initiales différentes sur chaque particule, nous pouvons considérer pour chaque particule une orientation cristallographique différente et distribuer cette même orientation sur les EFs d'une même cellule.

Dans un deuxième temps, si les résultats semblent prometteurs, il est possible de considérer des simulations où les grains seraient maillés. Lors du stage de DEA de Benoit Rey [REY 2003] réalisé au CEMEF, encadré par R. Logé et T. Coupez et co-encadré par Cyril Gruau et moi-même, le maillage de structures à grains colonnaires a été réalisé à l'aide d'une technique de maillage multi-domaine (Figure IX.1). Les grains étaient donc maillés et la connexion entre l'EF et le grain était donnée par le numéro du domaine auquel il appartenait. Il y avait donc dans le maillage autant de domaines que de grains dans l'éprouvette considérée. Benoit Rey a simulé le comportement de l'éprouvette à l'aide d'une loi de Norton-Hoff et des consistances différentes selon le grain considéré. Il est donc possible de considérer une loi de comportement monocristalline, en faisant varier l'orientation cristallographique d'un domaine à l'autre. Notons au passage qu'avec ce type d'approche, il serait également possible de représenter la sous-structure dendritique, du moins grossièrement.

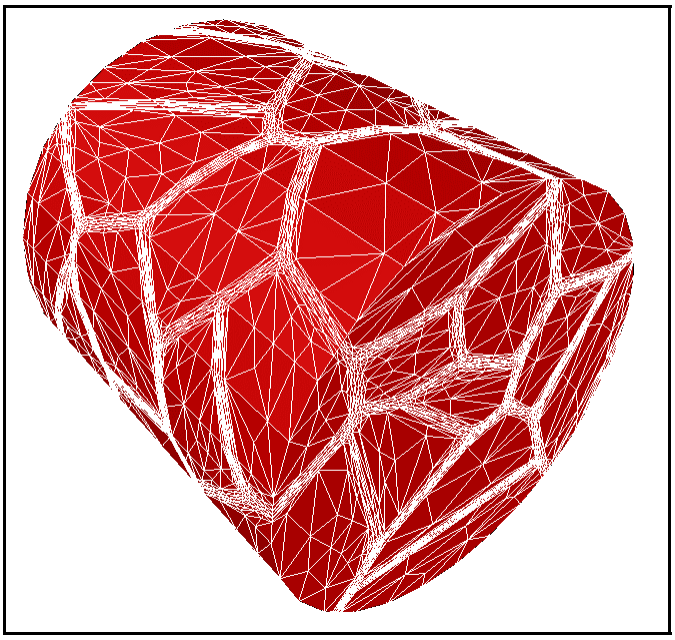


Figure IX.1 *Maillage du matériau contenant 50 grains.*

3.2 Placement et évolution des particules

Pour les simulations que nous avons considérées, nous avons établi une méthode de positionnement des particules impliquant des volumes de cellules quasi-uniformes. Cette méthode est spécifique à la géométrie des maillages que nous avons étudiées, le quart de cylindre. Dans un cas général, pour des volumes quelconques, il est nécessaire de pouvoir positionner les particules de manière à respecter les critères développés dans cette thèse. Nous proposons ici des suggestions pour répondre à ce problème.

3.2.1 Simplification de l'arithmétique des volumes des cellules

Dans un milieu continu (c'est-à-dire non discrétisé : sans EF), les volumes des cellules de Voronoï, définies par les particules, dépendent continûment des positions des particules. En étudiant la théorie des duaux de diagramme de Voronoï, on peut envisager un placement des particules permettant d'obtenir de façon exacte des volumes de cellules choisis. Pour un domaine d'espace donné (correspondant ici au lopin), on peut déterminer des positions de particules pour obtenir des cellules de volumes donnés.

Dans un maillage EF, le milieu est discrétisé. Les cellules ne dépendent plus continûment de la position des particules et les valeurs des volumes des cellules sont discrétisées. Les EFs proches de la frontière des cellules « continues » (i.e. les EFs presque équidistants de deux particules) peuvent être attribués à une cellule « discrète » alors qu'une partie de leur volume est contenue dans une autre cellule « continue ». Ce phénomène dépend de façon complexe des positions des particules et des nœuds du maillage, et pose un problème pour le contrôle du volume des cellules.

Une solution consiste à diminuer la taille de maille pour les éléments proches de la frontière des cellules (cf. par exemple la Figure IX.1). Le nombre d'EFs dans le maillage augmente alors de façon importante.

Inversement, augmenter la taille des cellules en diminuant le nombre de particules permet de diminuer les « erreurs relatives » sur les volumes, mais va à l'encontre des critères établis dans cette thèse.

Nous avons testé une solution qui fournit des résultats très satisfaisants, mais, n'ayant pas justifié mathématiquement ses propriétés, et ne l'ayant utilisée que partiellement pour la position initiale des particules dans le cas de la simulation de l'AA7175 filé, nous ne l'avons pas incluse dans le corps de la thèse. Nous la présentons ici en perspective de travaux futurs dans la mesure où elle permet de contrôler le volume des cellules.

Soient M_k la position de la particule k, V_k le volume de la cellule associée à la particule k dans le maillage EF et Vd_k le volume désiré pour cette cellule. On déplace les particules, en notant $M_k = M_k^0$ et $V_k = V_k^0$ les valeurs initiales, et en définissant récursivement la suite M_k^i de la manière suivante :

$$\overrightarrow{M_k^i M_k^{i+1}} = \sum_{l \neq k} \left(\frac{V_l^i}{Vd_l} - \frac{V_k^i}{Vd_k} \right) \frac{\overrightarrow{M_k^i M_l^i}}{\left\| \overrightarrow{M_k^i M_l^i} \right\|} \qquad \delta \quad \forall k ,$$

où les V_k^i sont les volumes des cellules correspondant aux particules placées aux points M_k^i et δ est un pas de longueur très petit devant la taille de maille des EFs.

Les suites V_k^i tendent vers les Vd_k et les positions M_k^i tendent vers des limites M_k^∞. Si les particules sont positionnées initialement de manière à ce que les volumes V_k soient proches des volumes désirés Vd_k, le déplacement total des particules $\left\| \overrightarrow{M_k M_k^\infty} \right\|$ est petit. Ces propriétés ont été vérifiées numériquement.

On a donc, en déplaçant les particules, adapté leurs positions au maillage EF. Si l'on choisit des Vd_k avec une « arithmétique simple » (proportions entre les volumes), on peut donc diminuer le nombre de textures à distribuer sur les cellules.

3.2.2 Métrique évoluant avec la déformation

Pour définir les cellules après remaillage, on a utilisé la métrique euclidienne. La forme des nouvelles cellules respecte spontanément la déformation du matériau, du fait que les particules se déplacent avec la matière au cours de la déformation, et que le dual de diagramme de Voronoï évolue de façon correspondante. Cependant, lorsque les particules se rapprochent (comme par exemple pour un cas de compression), la sensibilité du dual vis-à-vis de petits déplacements des particules augmente.

Nous n'avons pas étudié cette théorie mais présentons un schéma simple en 2D pour illustrer ce phénomène (cf. Figure IX.2).

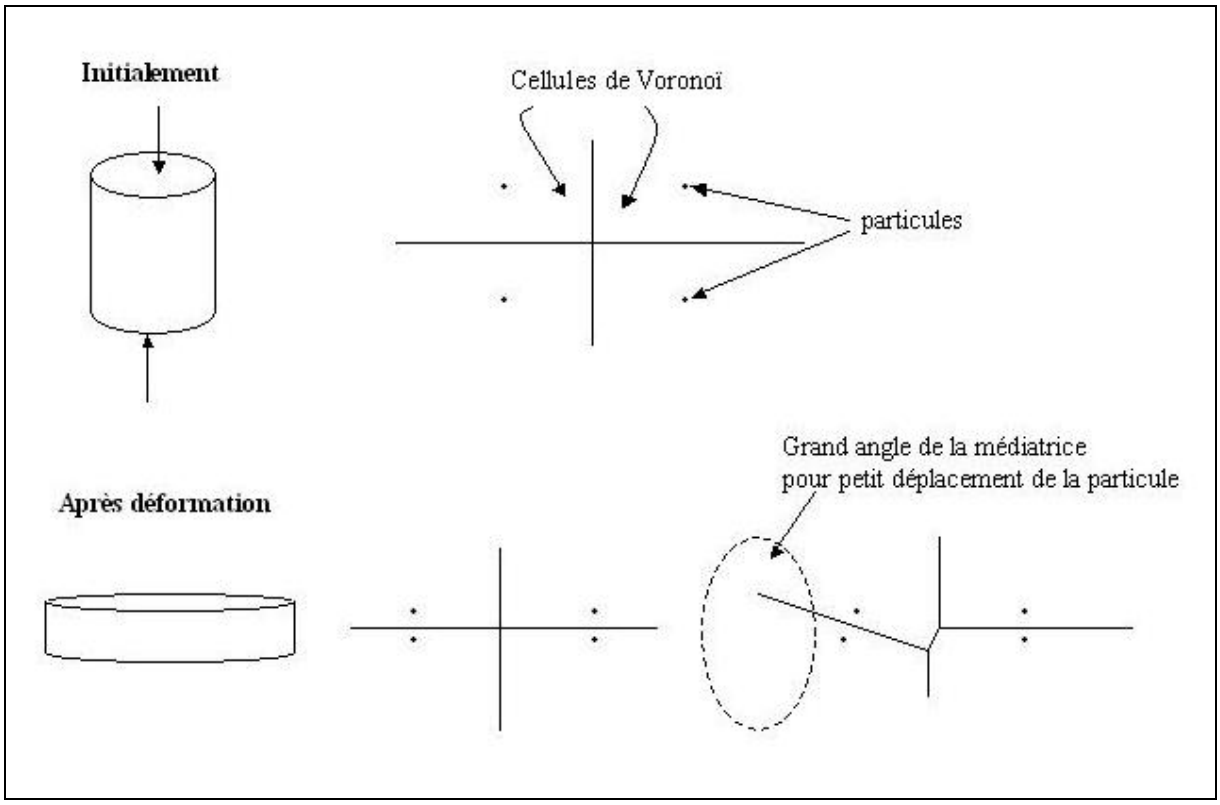


Figure IX.2 *Sensibilité des cellules de Voronoï aux positions des particules lorsqu'elles se rapprochent.*

Pour pallier ce problème, on peut utiliser une nouvelle métrique pour définir les critères d'attribution des EFs aux cellules. Pour une particule *k* positionnée en M_k, on définit la distance $d_k(M)$ d'un point *M* de l'espace à la particule *k* par :

$$d_k(M) = \left\| \left(Id + Grad\, u_k\right)^{-1} \overrightarrow{M_k M} \right\|,$$

où $Grad\, u_k$ est un tenseur représentant la moyenne des gradients de déplacement des EFs de la cellule. Un EF de centre de gravité M_e est attribué à la particule *k* si $d_k(M_e) \leq d_l(M_e)\ \forall l$.
Ce nouveau critère d'attribution permet de faire disparaître le problème lié à la sensibilité des cellules de Voronoï définies à partir de la métrique euclidienne.

Nous n'apportons pas de démonstrations à ces propriétés mais présentons un schéma simple (Figure IX.3) en 2D correspondant au cas de la Figure IX.2 pour les illustrer.

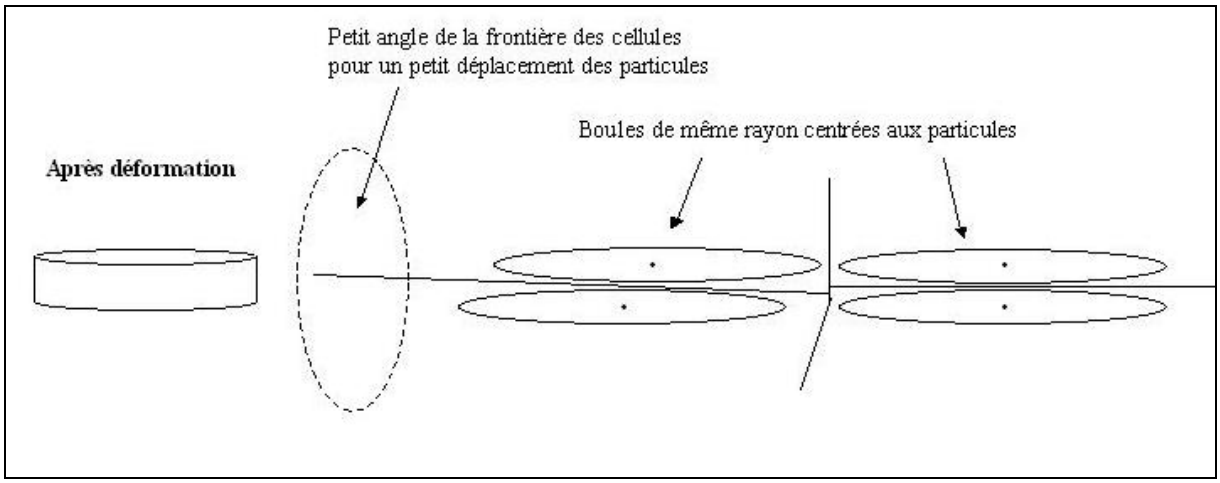


Figure IX.3 *Dépendances des cellules définies par les nouvelles métriques vis-à-vis des positions des particules.*

3.2.3 Point de vue utilisateur

Pour la version utilisateur de Forge3®, on peut envisager d'automatiser ou de permettre à l'utilisateur de spécifier un certain nombre de paramètres, parmi lesquels :

- le nombre de particules,
- les positions des particules, qui peuvent être plus denses dans des zones où une étude précise est nécessaire ou désirée, en se basant sur l'état initial de la pièce ou par une méthode de capteurs inverses.

Concernant la méthode présentée en 3.2.1, on peut envisager que l'utilisateur puisse spécifier les Vd_k qu'il désire. On peut aussi implémenter une procédure qui, à partir de positions de particules données et d'un critère de « simplicité arithmétique » donné, détermine des Vd_k proches des V_k initiaux et qui respectent le critère arithmétique. Les Vd_k étant proches des V_k , en utilisant la méthode décrite en 3.2.1, on opère un petit déplacement sur les positions des particules pour obtenir des cellules de volumes désirés Vd_k . Les Vd_k respectant le critère de « simplicité arithmétique », le nombre de textures à distribuer dans les cellules est diminué.

3.3 Optimisation du nombre de textures

Concernant la prédiction d'anisotropie mécanique avec le modèle polycristallin couplé à la méthode de distribution des orientations, il serait nécessaire de contrôler le paramètre écart-type du poids des orientations de la texture initiale au cours de la déformation. En effet, nous avons vu que dans certains cas, ce paramètre évoluait énormément au cours de la déformation, suite aux variations de volume des EFs et induisait une moins bonne prédiction d'anisotropie. Ce phénomène se produit lors des simulations sans remaillage. En effet, lorsqu'il y a remaillage, les données microstructurales sont redistribuées selon le volume des EFs, ce qui permet d'avoir un écart-type plus petit en comparaison de celui obtenu sans remaillage. Il serait donc intéressant de définir un critère pour contrôler la valeur de ce paramètre qui serait de la forme suivante :

- En début de simulation, une valeur critique pourrait être entrée par l'utilisateur en fonction de la prédiction d'anisotropie qu'il souhaite.
- Ensuite, à chaque incrément de temps, la valeur courante de ce paramètre pourrait être calculée et dans le cas où la valeur serait supérieure à la valeur critique, les orientations pourraient être à nouveau distribuées dans le maillage EF courant.

L'implémentation de ce critère nécessite de considérer, même dans le cas de simulations sans remaillage, un nombre *p* de particules dans le maillage dans la mesure où les variables polycristallines seraient redistribuées sur les EFs au cours de la simulation. Il faut bien sûr vérifier que le mélange des

orientations lors de la redistribution ne génère pas des erreurs sur la prédiction d'anisotropie plus élevées que si la distribution était maintenue constante au cours de la simulation.

Dans le cas des simulations avec maillage adaptatif, le maillage est raffiné dans les zones les plus sollicitées. Le nombre d'EFs d'une zone à l'autre peu donc énormément varier et mener à une mauvaise représentation de la microstructure sur certaines zones (si le nombre de textures à distribuer dans une zone est calculé uniquement par rapport au volume de la zone sans que soit pris en compte le nombre d'EFs dans la zone). Dans ce type de simulations, l'écart-type relatif du poids des orientations pourrait être calculé. Un critère semblable au précédent pourrait être implémenté afin d'optimiser le nombre de textures à distribuer dans les cellules et de ne pas l'augmenter excessivement. Pour analyser ce phénomène dans le cadre de la thèse, nous avons étudié (chapitre VI section VI.4.1) une simulation avec une taille de maille, lors du remaillage, différente de la taille de maille initiale. Pour cette simulation, nous avions fixé à 50 le nombre d'orientations moyen par EF, induisant une augmentation du nombre de textures après le changement de taille de maille. En relaxant ce critère sur le nombre moyen d'orientations par EF, et en ajoutant un critère sur l'écart-type relatif, ce nombre pourra être optimisé. L'optimisation devra aussi se faire sur un bon positionnement des particules pour que les cellules correspondantes soient dans des zones où la déformation ne varie pas trop.

3.4 Autres utilisations de la méthode de transport

Il serait aussi intéressant de tester cette méthode de transport des variables polycristallines lorsque l'on utilise d'autres modèles polycristallins. Le premier test à réaliser pour savoir si la méthode est applicable ou pas à un autre modèle polycristallin est sans doute de voir si considérer des textures partielles à chaque point d'intégration du maillage EF permet de prédire correctement l'anisotropie mécanique lors de simulations sans remaillage. Ce travail a déjà débuté en octobre 2005 avec la thèse de Mickaël Knoll, dans laquelle le modèle polycristallin est cette fois le modèle auto-cohérent de Tomé et Lebensohn [LEB 1993], applicable aux matériaux de basses symétries cristallines.

Une étude intéressante consisterait à tester cette méthode de transport basée sur le concept des particules Lagrangiennes pour le suivi d'autres types de données microstructurales qui ne peuvent pas être interpolées à l'aide des méthodes de transport classiques, comme par exemple la morphologie des grains ou la connectivité des phases.

Références bibliographiques

[DEL 2006] L. Delannay, P.J. Jacques, S.R. Kalindidi, Finite element modeling of crystal plasticity with grains shaped as truncated octahedrons, Int. J. Plasticity 22, pp. 1879-1898, 2006.

[DEL 2005] L. Delannay, M. Béringhier, Y. Chastel, R.E. Logé, Simulation of Cup-Drawing Based on Crystal Plasticity Applied to Reduced Grain Samplings, Materials Science Forum, 495-497, 1639-1644, 2005.

[LEB 1993] R.A. Lebensohn and C.N. Tomé, a self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys, Acta Metall. Mater. 41, pp. 2611-2624, 1993.

[REY 2003] B. Rey, Simulation numérique du comportement mécanique de matériaux hétérogènes : prise en compte explicite de la topologie. Rapport de stage de DEA Mécanique Numérique, CEMEF, 2003.

Résumé :

Pour la prédiction de l'anisotropie mécanique induite par la microstructure du métal ainsi que le suivi de l'évolution de la texture cristallographique lors de la simulation des procédés de mise en forme, nous utilisons le couplage de la méthode EF à un modèle polycristallin. Pour ce type de couplage, le polycristal est souvent modélisé par sa texture discrétisée, qui est habituellement considérée à chaque point d'intégration du maillage, générant ainsi des temps de calcul très élévés. Afin de diminuer le temps de calcul de ce type d'approche, nous utilisons dans ce travail le concept des particules Lagrangiennes. Les particules Lagrangiennes permettent de subdiviser le volume étudié en cellules. Au lieu de considérer une texture par point d'intégration, la texture est distribuée sur les points d'intégration d'une même cellule. Ainsi, sur chaque point d'intégration du maillage, seule une partie de la texture est considérée, diminuant par conséquent le nombre total de textures placées dans le maillage et le temps de calcul. De plus, lors des simulations des procédés de mise en forme en grandes déformations, le remaillage est souvent nécessaire. L'introduction de particules Lagrangiennes dans le maillage permet de transporter les variables microstructurales, alors que certaines ne peuvent l'être par les méthodes de transport classiques. Cette méthode basée sur le concept des particules Lagrangiennes a été validée à l'aide des expériences suivantes : compressions uniaxiales d'éprouvettes issues d'un acier brut de solidification présentant une texture marquée dans sa zone colonnaire induite par le procédé de solidification, et compressions sur génératrice d'un alliage d'alumium, présentant une texture marquée induite par le filage.
La méthode mise en place dans ce travail est présentée dans le cadre général de la simulation de procédés de mise en forme en grandes déformations, où les variables microstructurales du matériau évoluent et déterminent la loi de comportement de celui-ci.

Mots-clés : Anisotropie, texture cristallographique, microstructure, éléments finis, remaillage, temps de calcul.

Abstract :

In order to predict mechanical anisotropy due to metal microstructure and to follow crystallographical texture evolution in the simulation of forming processes, we use the coupling of the FE method with a polycrystalline model. For this kind of coupling, the polycrystal is often represented by its discretized texture, which is usually considered at each integration point in the mesh, thereby generating very large computation times. In order to decrease computation time for this kind of approach, we use in this work the Lagrangian particle concept. The Lagrangian particles allow to divide the studied volume into cells. Instead of considering one texture by integration point, the texture is distributed among the integration points in a given cell. Hence, at each integration point in the mesh, only a part of the texture is considered, consequently decreasing the overall number of textures in the mesh and computation time. Moreover, remeshing is often necessary when dealing with large deformations in the context of forming processes. The use of Lagrangian particles allows the microstructural variables to be transferred from the old mesh to the new one, whereas classical interpolation methods are not appropriated for some of these variables. This Lagrangian particles based method has been validated with the following experiments : uniaxial compression of samples of a rough-cast steel exhibiting a pronounced texture in its columnar zone induced by the casting process, and compression of an aluminium alloy exhibiting a pronounced texture induced by the extrusion.
The method developed in this work is presented in the general framework of large deformations processes where the material microstructural variables evolve and determine the material constitutive behaviour.

Keywords : Anisotropy, crystallographic texture, microstructure, finite elements, remeshing, computation time.