

HOMOGENÉISATION : LES MICROSTRUCTURES ONT-ELLES LEUR MOT À DIRE ?

R. QUEY^a, D. BRITTON^a, F. VILLETTE^a

^a Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SMS, F – 42023 Saint-Etienne, France, romain.quey@mines-stetienne.fr

Mots clés : polycristal, orientations, élasticité cubique, VER, éléments finis

Dans cette étude, nous nous interrogeons sur les effets des variabilités des propriétés des microstructures polycristallines sur la taille du volume élémentaire représentatif (VER), et sur la possibilité d'utiliser des microstructures "uniformisées" dans le cadre d'approches d'homogénéisation directes (par "calcul de microstructures"). On traite en particulier du cas d'une microstructure expérimentale de "croissance de grains", et on s'intéresse aux variabilités associées (i) à la distribution de tailles de grains et (ii) à la nature aléatoire de la distribution des orientations cristallines des grains.

Dans une première partie, nous présentons des méthodes de génération de microstructures polycristallines. La première méthode concerne la représentation morphologique des microstructures à partir de propriétés statistiques "cibles", par optimisation de tessellations de Laguerre. Cette méthode générale permet de représenter toute microstructure polycristalline conventionnelle (*i.e.*, ne présentant pas de subdivisions de grains), sous l'hypothèse de grains convexes [1,3]. La seconde méthode concerne la génération de distributions d'orientations cristallines uniformes. Cette méthode consiste à minimiser l'énergie potentielle d'un ensemble d'orientations cristallines représentées par des quaternions unitaires (de manière similaire au problème de Thomson) [2,3].

Dans une seconde partie, nous appliquons ces méthodes au cas d'un polycristal de "croissance de grains" de cuivre déformé en élasticité (élasticité cristalline cubique). Nous montrons qu'il est possible d'utiliser une microstructure "uniformisée" dans le cadre d'une approche d'homogénéisation, et que cela permet une réduction de l'erreur sur l'estimation du module de cisaillement par un facteur 7.7 et de la taille du VER par un facteur 60. Ainsi est-il possible d'obtenir une estimation du module de cisaillement avec une incertitude de 2% avec un microstructure polycristalline "uniformisée" comprenant 56 grains, contre 3364 grains pour une microstructure expérimentale de "croissance de grains". Pour une microstructure de "croissance de grains", nous montrons que l'incertitude est associée à 57% à l'effet de la distribution de taille de grains, à 33% au caractère aléatoire de la distribution d'orientations cristallines, et à 10% à son caractère discret.

Références

- [1] R. Quey, A. Villani and C. Maurice. Nearly uniform sampling of crystal orientations *Journal of Applied Crystallography*, 51 (2018), 1162–1173.
- [2] R. Quey and L. Renversade. Optimal polyhedral description of 3D polycrystals : Method and Application to statistical and synchrotron X-ray diffraction data, *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 330 (2018), 308–333.
- [3] Neper. <https://neper.info>.