

**SIMULATION MULTI-ECHELLE DU
COMPORTEMENT MECANIQUE D'UN ALLIAGE
DE TITANE TI-6AL-4V: Etude de L'influence de la
Taille, la Dispersion Relative et la Texture
Cristallographique des Grains**

F Benmessaoud, Mohammed Cheikh, Vincent Velay, Vanessa Vidal, Farhad
Rezai-Aria, Christine Boher

► **To cite this version:**

F Benmessaoud, Mohammed Cheikh, Vincent Velay, Vanessa Vidal, Farhad Rezai-Aria, et al.. SIMULATION MULTI-ECHELLE DU COMPORTEMENT MECANIQUE D'UN ALLIAGE DE TITANE TI-6AL-4V: Etude de L'influence de la Taille, la Dispersion Relative et la Texture Cristallographique des Grains. ICEMAEP2018, Apr 2018, Constantine, Algérie. hal-01866326

HAL Id: hal-01866326

<https://hal-mines-albi.archives-ouvertes.fr/hal-01866326>

Submitted on 3 Sep 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

SIMULATION MULTI-ECHELLE DU COMPORTEMENT MECANIQUE D'UN ALLIAGE DE TITANE TI-6AL-4V:

Etude de L'influence de la Taille, la Dispersion Relative et la Texture Cristallographique des Grains

F. Benmessaoud^{1*}, M. Cheikh¹, V. Velay¹, V. Vedal¹, F. Rezai-Aria¹, C. Boher¹

¹ Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, ICA (institut clément Ader) Compus Jarlard81013 Albi Cedex 09 France,
81000

*fbenmess@mines-albi.fr

RÉSUMÉ

Ce travail consiste à étudier l'effet de la taille, la dispersion et la texture cristallographique des grains sur le comportement mécanique d'un alliage de titane Ti-6Al-4V. L'investigation des champs mécaniques (contraintes et déformations) est effectuée aux différentes échelles, sous chargement quasi-statique monotone de traction. Le modèle de comportement utilisé est développé dans le cadre de l'approche de plasticité cristalline.

Douze volumes élémentaires représentatifs (VER) permettant la prise en compte des paramètres stériologiques (taille, dispersion et texture cristallographique) sont construits, puis la simulation du comportement mécanique du Ti-6Al-4V est effectuée en utilisant le modèle de méric-Cailletaud [1] en corporation avec la méthode des éléments finis. Enfin, l'influence des éléments microstructurales du matériau est analysée.

Les résultats montrent que le comportement mécanique macroscopique du Ti-6Al-4V est fortement lié à la texture cristallographique des grains, cette dernière donne à la déformation plastique de l'alliage Ti-6Al-4V un caractère hétérogène ainsi qu'un comportement mécanique macroscopique anisotrope. La taille moyenne des grains influe également sur les propriétés mécaniques du Ti-6Al-4V, en particulier sur la limite d'élasticité; en diminuant la taille moyenne des grains, la limite d'élasticité augmente. Enfin la distribution des tailles des grains influe sur le comportement local du matériau, elle donne aux champs de déformation une hétérogénéité suffisante lorsque la dispersion augmente.

Mots Clés: *Alliage de titane Ti-6Al-4V, Plasticité cristalline, texture cristallographique, tailles et dispersion des grains, modélisation multi-échelle*

NOMENCLATURE.

Symboles :

E Module de young, MPa
n Exposant de viscosité
K Paramètre de viscosité
b Paramètres d'écrouissage isotrope du matériau
Q Paramètres d'écrouissage cinématique du matériau
C Coefficient d'écrouissage cinématique
D Diamètre moyenne des grains
h Matrice d'interaction entre systèmes de glissement
d Coefficient d'écrouissage cinématique

Lettres grecques :

$\dot{\gamma}^s$ Vitesse de glissement de système de glissement s

τ^s Cission résolue de système de glissement s
 χ^s Variable d'écrouissage cinématique du système
 ν Coefficient de poisson
 γ^s Déformation cumulée dans un système s
 τ^s Cission résolue du système de glissement s ;
 τ_{CRSS}^f Cission critique d'activation des systèmes de glissement de la famille f

Indices / Exposants :

f famille de systèmes de glissement (B basale, P prismatique ou π pyramidale)
rs interaction entre le système s et r
s un système de glissement

1. INTRODUCTION

En raison des caractéristiques performantes de l'alliage de titane Ti-6Al-4V notamment sa résistance spécifique et sa résistance à la fatigue et à la corrosion, cet alliage est très approprié pour la fabrication de nombreuses pièces de l'industrie aéronautique et aérospatiale.

A température ambiante, le comportement mécanique du Ti-6Al-4V est généralement contrôlé par le comportement de la phase alpha (le pourcentage de phase bêta est inférieur à 8%) [2, 3, 4, 6]. Les éléments additifs notamment l'aluminium réduit la présence de mécanisme de maclage exist déjà dans le titane pure, pour 6% d'Aluminium, ce mécanisme disparaît [6, 4]. La déformation plastique de la phase alpha est donc assurée par uniquement le glissement cristallographique (le mouvement de dislocations). Plusieurs obstacles et mécanismes peuvent confronter le mouvement de dislocations (les joints des grains par exemple) et provoquent par conséquent un écrouissage du matériau à l'échelle globale. L'aspect des grains de la phase et la nature hexagonale compacte de son réseau cristallographique donnent à la déformation plastique ainsi des caractéristiques hétérogènes, discontinues et anisotropes à l'échelle locale. Pour ces raisons, la modélisation du comportement mécanique de ce matériau nécessite la prise en considération de ses mécanismes microstructuraux. La modélisation élasto-viscoplastique locale dans le cadre de plasticité cristalline peut répondre à cette problématique. Parmi les modèles élasto-viscoplastiques fréquemment utilisés dans ce cadre, celui de Méric-Cailletaud [1]. Ce modèle a été utilisé par T. Dick et al [3, 6, 7] pour étudier le comportement en fretting et en fretting fatigue de l'alliage Ti-6Al-4V. C.Gérard [8] a développé une démarche multi-échelles pour décrire les chargements complexes et cycliques de fatigue en comparant deux types d'approches : quasi-physiques de Tabourot [9] et phénoménologique de Méric-Cailletaud [1], les résultats de son travail montrent que le modèle de Méric-Cailletaud est plus flexible en terme de facilité d'identification des paramètres en comparaison avec celui de Tabourot.

Dans notre étude, nous allons utiliser le modèle de Méric-Cailletaud [1] pour simuler le comportement mécanique en traction d'un alliage Ti-6Al-4V. La loi de comportement est écrite à l'échelle microscopique (au niveau des systèmes de glissement) tandis que les champs mécaniques (contraintes et déformations) sont investigués à l'échelle mésoscopique (au niveau des grains) et à l'échelle macroscopique (globale). A travers ces simulations numériques, nous allons étudier l'effet de la taille, la dispersion relative et la texture cristallographique des grains sur les propriétés mécaniques de Ti-6Al-4V.

2. PROCEDURE NUMERIQUE

2-1- Équations constitutives à l'échelle locale

Le modèle de Méric-Cailletaud [1] est utilisé dans ce travail, il permet la prise en compte des effets de la microstructure du matériau d'une manière phénoménologique dans l'écriture des lois gouvernant l'écoulement visco-plastique des grains. Dans ce modèle de comportement, les équations constitutives sont écrites à une échelle locale et le comportement global est déduit par le biais d'une technique de transition d'échelle notamment la méthode des éléments finis.

Écoulement viscoplastique

La vitesse d'écoulement viscoplastique de chaque système de glissement cristallographique $\dot{\gamma}^s$ est donnée sous la forme d'une fonction puissance de la cisssion résolue τ^s i.e. de type Norton :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - \chi^s| - r^s - \tau_{CRSS}^f}{K^s} \right\rangle^n \text{sign}(\tau^s - \chi^s) \quad (1)$$

$\dot{\gamma}^s$: Vitesse de glissement de chaque système de glissement s ;

τ^s : Cission résolue du système de glissement s donnée par la loi de Schmid [5];

χ^s : Variable d'écrouissage cinématique du système s ;

r^s : Variable d'écrouissage isotrope du système s ;

K^s et n caractérisent la viscosité du matériau;

τ_{CRSS}^f : Cission critique d'activation des systèmes de glissement de la famille f ; (Pour l'alliage de titane Ti-6Al-4V, la famille f peut être prismatique, basale ou pyramidal).

Écrouissage isotrope

Décrit l'augmentation de la cission critique sur un système avec le glissement cumulé sur chacun des systèmes :

$$r^s = Q_f \sum_r h^{sr} (1 - \exp(-bv^r)) \quad (2)$$

b et Q_f : paramètres d'écrouissage du matériau ;

h^{sr} : Matrice d'interaction entre les systèmes de glissements ;

v^r : Déformation cumulé dans un système de glissement s ;

Écrouissage cinématique

$$\chi^s = C\alpha^s \quad (3)$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\dot{v}^s \alpha^s \quad (4)$$

C et d : paramètres d'écrouissage cinématique;

α^s : Variable d'état interne de système s ;

2-2- Génération de la microstructure de Ti-6Al-4V

La génération de la microstructure de l'alliage Ti-6Al-4V dans ce travail est effectuée en utilisant une approche numérique probabiliste de Voronoï. Cette approche consiste à construire un volume élémentaire représentatif (VER) comporte des tessellations dites « tessellations de Voronoï».

Douze VER sont générés par l'approche probabiliste de Voronoï. Ils permettent la prise en compte des caractéristiques microstructurales prépondérantes de Ti-6Al-4V, notamment sa morphologie et sa texture cristallographique d'une manière assez facile mais aussi plus réaliste.

Morphologie virtuelle de Ti-6Al-4V

Deux types de tessellations de Voronoï avec deux distributions différentes des tailles des grains sont générés :

- **Tessellations à distribution de Dirac** : traduit un alliage Ti-6Al-4V fortement homogène, avec une dispersion relative $\frac{\Delta D}{D} \approx 0$. (voir figure 1-a).
- **Tessellations à distribution log-normal** : traduit un alliage Ti-6Al-4V hétérogène, la dispersion dans ce cas doit être strictement supérieure à 0 ($\frac{\Delta D}{D} > 0$). Dans ce travail, nous considérons le Ti-6Al-4V plus ou moins hétérogène avec une dispersion relative $\frac{\Delta D}{D} = 1$. (voir figure 1-b).

où ΔD : la différence entre le diamètre du grain le plus petit (D_{min}) et le plus grand (D_{max}), D est le diamètre moyen des grains au sein du volume élémentaire représentatif (VER) généré.

La forme des grains est considérée équiaxe, ce qui traduit la forme réelle des grains au sein de l'alliage Ti-6Al-4V étudié, la distribution de sphéricité des grains est considérée donc de type log-normal à faible écart type ($\tau = 0.03$) comme le montre la figure 2.

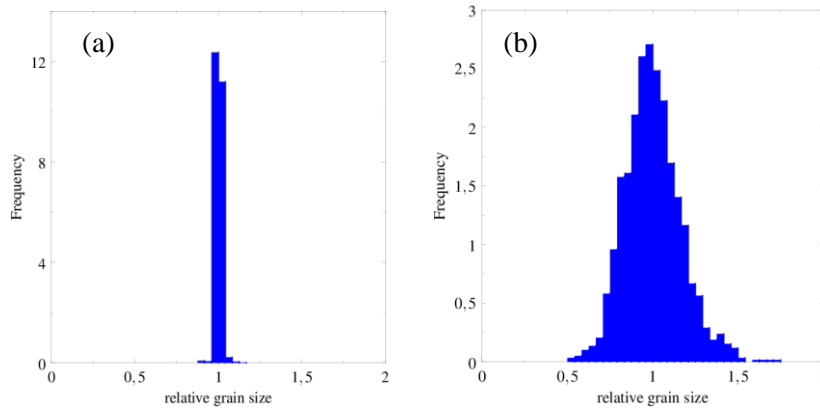


FIGURE 1. Distribution des tailles des grains (a) : Dirac (b) : log-normal

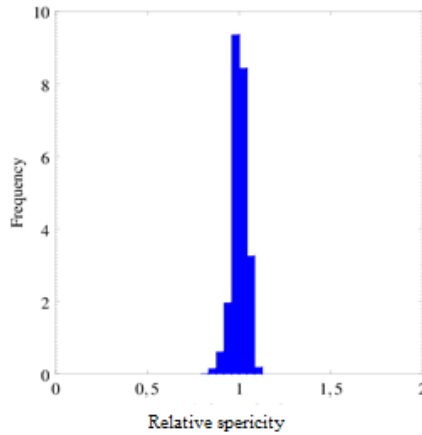


FIGURE 2. Distribution log-normal de sphéricité des grains

Les deux VER construits par les deux types de distributions des tailles sont illustrés dans la figure 3.

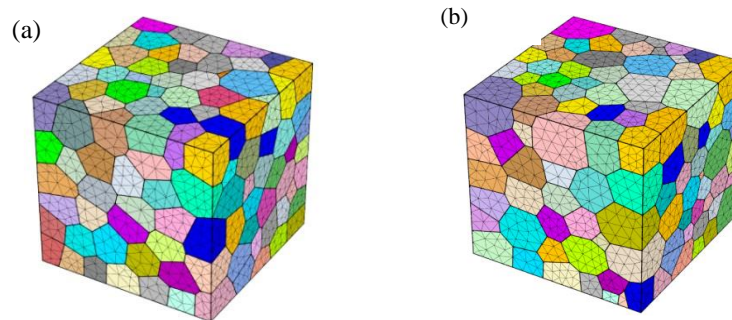


FIGURE 3. VER à distribution des tailles des grains de type : (a) Dirac, (b) log-normal

Texture cristallographique de Ti-6Al-4V

Les orientations cristallographiques des grains sont définies par des angles d'Euler permettant de passer du repère global de l'échantillon au repère du cristal par des rotations anti horaires. Trois textures

cristallographiques nommées Tx1, Tx2 et Tx3 sont étudiées. La texture cristallographique est générée par le biais du Toolbox « MTEX » de MATLAB et présentée sous forme de figures de pôles pour les trois cas étudiés (voir figure 4).

La texture Tx1 permet de considérer l'alliage Ti-6Al-4V comme étant un matériau faiblement texturé et donc isotrope dont l'ensemble des grains au sein du VER sont orientés aléatoirement. La texture Tx2 est générée d'une manière à considérer l'existence de certaines macro-zones (ensemble des gains voisins ayant la même orientation cristallographique), ce qui rend le matériau plus ou moins texturé. La texture Tx3 définit un alliage de titane Ti-6Al-4V fortement texturé et donc fortement anisotrope dont les orientations de l'ensemble des grains sont identiques.

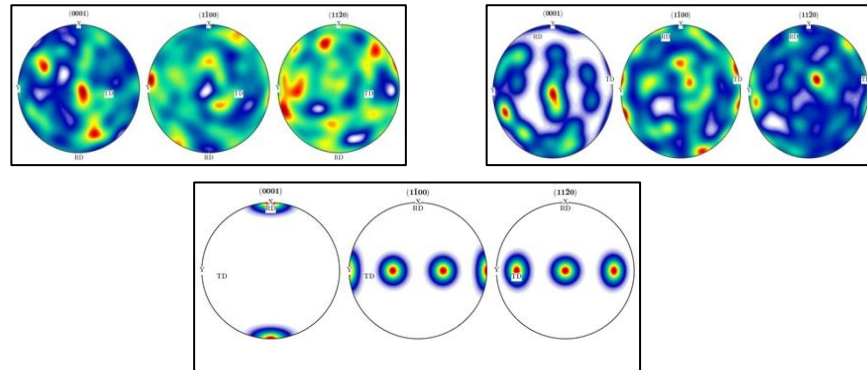


FIGURE 4. Figure de pôles : (a) Tx1, (b) Tx2, (c) Tx3

2-3- Maillage et conditions aux limites

La technique de maillage proposée par Quey et al [12] et disponible dans le code de génération des microstructure NEPER est adoptée. Le type des éléments de maillage utilisé est tétraédrique quadratique (C3D10) avec une taille moyenne de 0,00125 mm par élément. Le nombre total d'éléments est d'environ 119650. Les Volumes Elémentaires Représentatifs (VER) construits sont subis à des conditions aux limites d'un essai de traction.

Le maillage ainsi que les conditions aux limites sont présentées dans la figure 5.

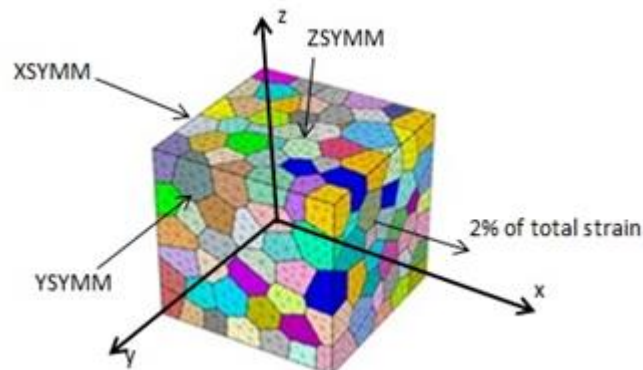


FIGURE 5. Maillage et conditions aux limites d'un VER $120 \times 120 \times 120 \mu\text{m}^3$

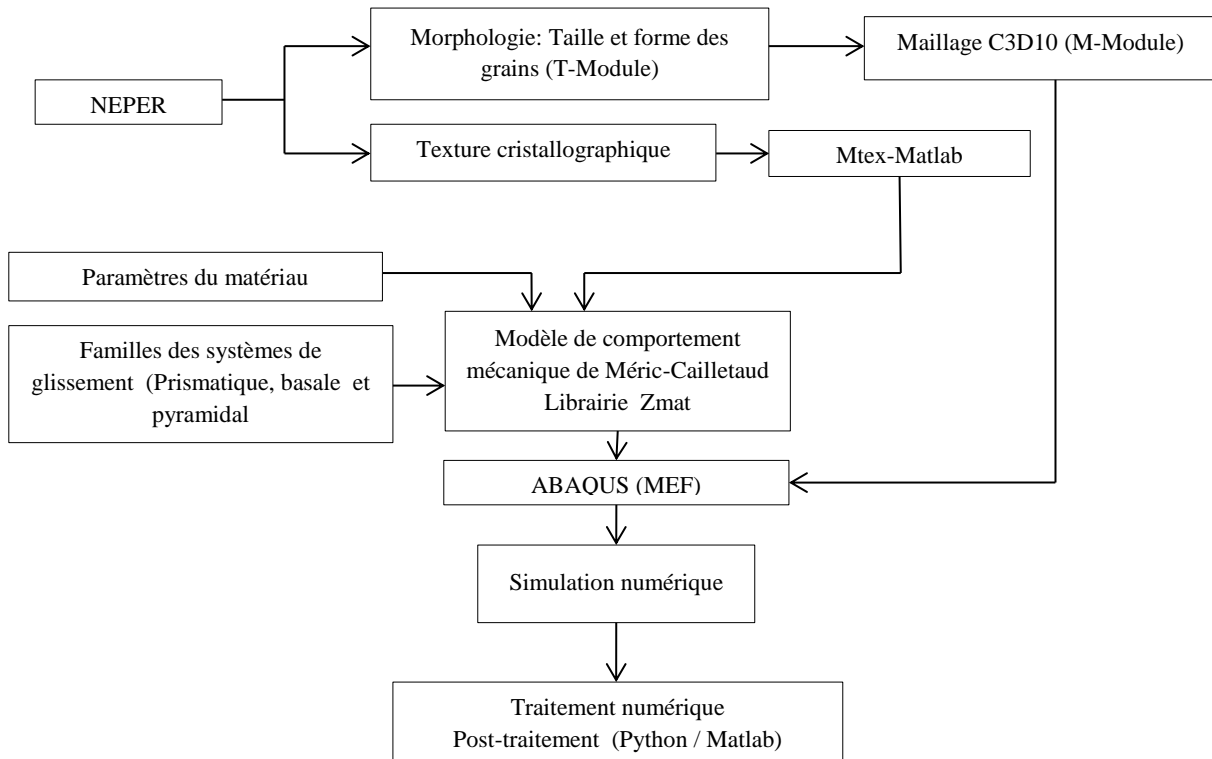
2-4- Paramètres du matériau

Les paramètres du matériau utilisés sont ceux identifiés par T. Dick et al [3] (voir tableau1).

Q (Mpa)			b	C (Mpa)	d	E (Gpa)	ν	n	K (Mpa.s ^{1/n})	τ_{CRSS}^f (Mpa)		
B	P	π								B	P	π
-49	-52	-83	2	30.000	300	119	0.29	7.41	20	280	300	540

TABLEAU 1. Paramètres du modèle d'un alliage de titane Ti-6Al-4V [3]

Le modèle numérique de Méric Cailletaud [1] utilisé est disponible dans la librairie Zmat. La simulation de l'essai de traction est effectuée par le biais du code des éléments finis ABAQUS. La procédure numérique peut être résumée dans le plan en dessous.



3. RESULTATS

3-1- Analyse du comportement mécanique à l'échelle macroscopique

À l'échelle globale, les réponses mécaniques en traction des différents VER construits permettent d'étudier l'influence de la taille, la dispersion relative et la texture cristallographique des grains. Les courbes de la simulation de tractions pour les différents VER sont illustrées dans les figures 6-8.

Effet de la taille des grains

D’après les courbes de la figure 6, et pour les deux types de dispersion relative, la taille des grains influe sur la limite d’élasticité du matériau, en augmentant la taille moyenne des grains, la limite d’élasticité diminue, ce qui est en accord avec la relation de Hall Petch [10 ,11] qui relie la limite d’élasticité à la taille moyenne des grains.

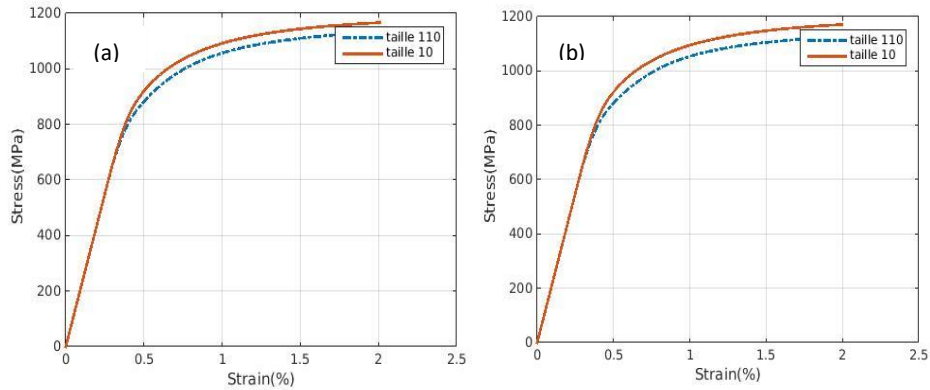


FIGURE 6. Influence de la Taille des grains, Texture cristallographique Tx2, (a): distribution de Dirac, (b):distribution log-normal

Effet de la texture cristallographique

Les résultats présentés dans les figures 7 et 8 montrent que la texture cristallographique n’influe pas seulement sur la limite d’élasticité de Ti-6Al-4V, mais aussi sur l’écrouissage du matériau. La texture cristallographique est le facteur le plus influant sur l’isotropie du matériau (plus le matériau est texturé, plus il est anisotrope) ce qui rend le comportement du matériau fortement lié à la direction de chargement.

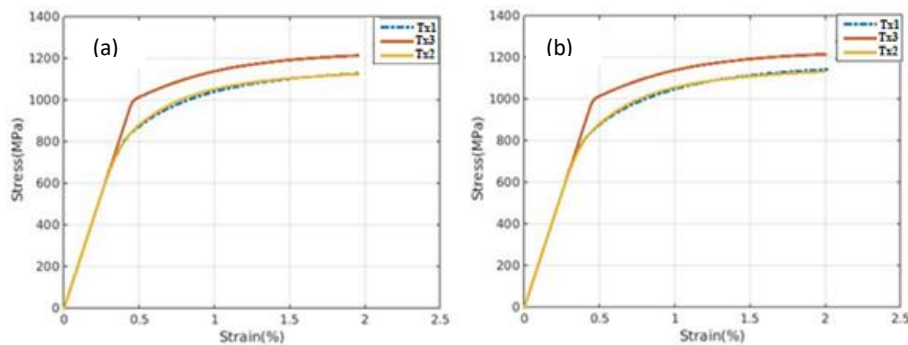


FIGURE 7. Influence de la texture cristallographique, Taille 110μm, (a) distribution de Dirac, (b):distribution log-normal

Effet de la dispersion relative des tailles des grains

La comparaison entre les deux configurations de dispersion relative étudiées : $\frac{\Delta D}{D} \approx 0$ (pas de dispersion) et $\frac{\Delta D}{D} \approx 1$ (voir figures 06,07 et 08) montre qu’il y a aucune influence des faibles dispersions sur le comportement macroscopique monotone de Ti-6Al-4V.

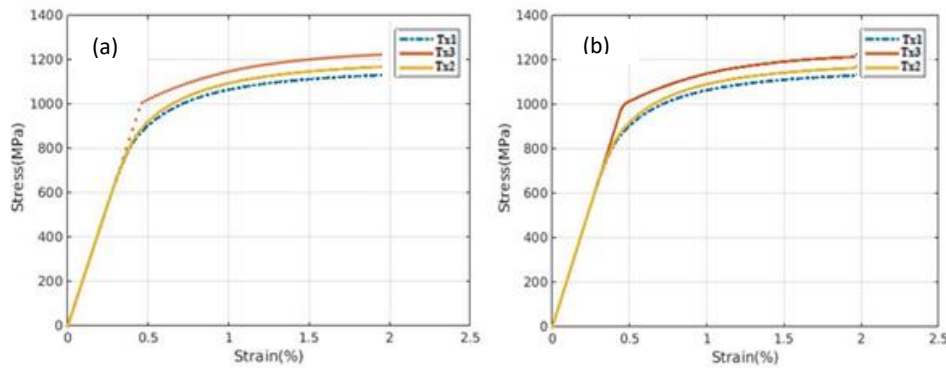


FIGURE 8. Influence de la texture cristallographique: Taille 10 μm , (a) distribution de Dirac, (b):distribution log-normal

3-2- Analyse du comportement mécanique à l'échelle locale des grains (mésoscopique)

Au cours de la déformation de l'agrégat, tous les grains commencent à se déformer élastiquement d'une façon identique (voir la figure 9), puis les gros grains commencent à s'accommoder plastiquement alors que les petits grains restent toujours en déformation élastique. La comparaison entre les deux distributions montre que la dispersion des tailles des grains influe sur le comportement local du fait que l'hétérogénéité augmente lorsque la dispersion relative $\frac{\Delta D}{D}$ augmente.

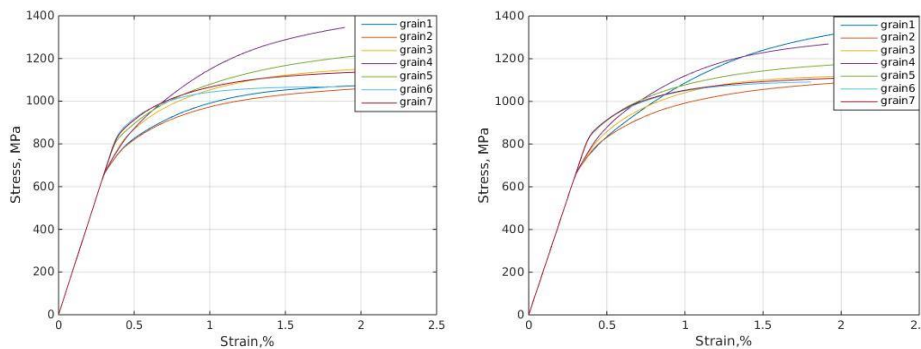


FIGURE 9. Influence de la distribution des tailles des grains sur le comportement local, pour une texture Tx1, taille moyenne 110 μm (a): distribution de Dirac, (b):distribution log-normal

4. CONCLUSIONS

Ce travail consiste à étudier l'effet de la taille, la dispersion relative et la texture cristallographique des grains sur le comportement mécanique d'un alliage de titane Ti-6Al-4V par le biais des simulations numériques. Le modèle introduit pour faire ces simulations est celui de Méric-Cailletaud [6] développé dans le cadre de la plasticité cristalline. Les équations constitutives sont écrites à l'échelle microscopique où l'écoulement viscoplastique dans les différents systèmes de glissement est décrit d'une manière phénoménologique. La transition de l'échelle locale vers l'échelle globale est effectuée par le biais de la méthode des éléments finis en introduisant le modèle déjà existant dans la bibliothèque Zmat au code ABAQUS.

Les résultats de la simulation numérique montrent que :

- La diminution de la taille des grains implique une augmentation de la limite d'élasticité ce qui est en accord avec la relation de Hall-Petch.
- L'effet de la texture cristallographique sur la limite d'élasticité et le taux d'écrouissage est prédominant par rapport à l'effet de la taille de grains, en revanche, la texture cristallographique rend le matériau fortement lié à la direction de chargement.
- La dispersion relative des tailles des grains influe sur le comportement local de Ti-6Al-4V, plus le matériau est hétérogène, plus le comportement varie d'un grain à un autre.

REFERENCES

- [1]: L. Méric, P. Poubanne and G. Cailletaud, Single Crystal Modeling for Structural Calculations: Part 1- Model Presentation, *Engineering and Materials Technology journal* 113, 162-170, 1991.
- [2]: J.M. Ambrico and M.R. Begley (2000), Plasticity in fretting contact, *Mechanics and Physics of Solids journal* 48, 2391–2417, 2000.
- [3]: T. Dick and G. Cailletaud, Fretting modelling with a crystal plasticity model of Ti6Al4V, *Computational Materials Science journal*, 38, 113–125, 2006.
- [4]: M.J. Philippe, M. Serghat, P. Van Houtte ad C. Esling, Modelling of texture evolution for materials of hexagonal symmetry: II. Application to zirconium and titanium α or near α alloys, *Acta journal of Metallurgica and Materialia*, 43, 1619–1630, 1995.
- [5]: E. Schmid and W. Boas, Kristallplastizität Mit Besonderer Berücksichtigung der Metalle 1995.
- [6]: T. Dick, C. Paulin, G. Cailletaud and S. Fouvry, Experimental and numerical analysis of local and global plastic behaviour in fretting wear Tribology, *International journal of tribology*, 39, 1036–1044, 2006.
- [7]: T. Dick, S. Basseville and G. Cailletaud, Fatigue modelling in fretting contact with a crystal plasticity model, *Computational Materials Science journal* 43, 36–42, 2008.
- [8]: C. Gérard, Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline, *Thèse de doctorat. Université paris 13-paris Nord institute*, 2008.
- [9]: L.Tabourot, M. Fivel and E. Rauch, Generalised constitutive laws for fcc single crystals, *Materials Science and Engineering journal*, A 23, 639–642, 1997.
- [10]: E.O. Hall, The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results, *Proceedings of the Physical Society journal*, 64, 747–753, 1951.
- [11]: N.J. Petch, The Cleavage Strength of Polycrystals, *Journal of the Iron and Steel Institute*, 174, 25-28, 1953.
- [12]: R. Quey, P.R.Dawson and F. Barbe, Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200, issue 17-20, .1729-1745, 2011.