

Modélisation par éléments finis de la mise en forme de tôles en Tantale à l'aide d'un modèle polycristallin homogénéisé

Alexandre THEALLER^{a,b}, Sylvain FLOURIOT^b, Victor DE RANCOURT^b, Emmanuelle MUNIER^b, Philippe PILVIN^c, Jean-Michel SCHERER^a, Samuel FOREST^a

^aMines Paris, Université PSL, Centre des Matériaux (MAT), UMR7633 CNRS, 78000 Versailles, France

^bCEA DAM Valduc , F 21120 Is Sur Tille , France

^cInstitut de Recherche Dupuy de Lôme (IRDL - CNRS FRE 3744) – Université de Bretagne Sud – Rue de Saint Maudé 56321 LORIENT Cedex, France

La simulation par éléments finis s'avère être un outil indispensable pour prédire l'évolution de la microstructure au cours des procédés de mise en forme, qui impacte directement les propriétés mécaniques en service des pièces ainsi fabriquées. Dans ce contexte, les modèles polycristallins sont particulièrement efficaces, puisqu'ils peuvent prédire simultanément le comportement mécanique macroscopique et l'évolution de la microstructure. Ces capacités de prévision sont particulièrement importantes pour la mise en forme de tôles de tantale pur, un métal très ductile qui présente des défis industriels significatifs pour le CEA. Néanmoins, les modèles polycristallins en champ complet restent trop coûteux pour des calculs de mise en forme, ce qui motive l'utilisation d'un modèle polycristallin homogénéisé.

Dans cette étude, des simulations par éléments finis d'un procédé spécifique de mise en forme de tôles en tantale ont été réalisées à l'aide d'Abaqus et d'un modèle polycristallin homogénéisé basé sur l'évolution de la densité de dislocations, appelé modèle en β [1], en employant un formalisme de grandes déformations. Ce modèle homogénéisé a d'abord été validé par des comparaisons avec des simulations polycristallines en champ complet et avec des résultats disponibles dans la littérature [2,3]. Le modèle a ensuite été calibré à partir d'essais mécaniques préalables réalisés à différentes vitesses de déformation et intègre des informations issues de la microstructure initiale du matériau, telles que la texture cristallographique. Pour les simulations de mise en forme, une attention particulière a été portée à la représentation précise des conditions aux limites du procédé. Ces conditions aux limites ont d'abord été validées à l'aide d'un critère de plasticité anisotrope de type Hill, puis un calcul éléments finis du procédé de mise en forme a été réalisé avec le modèle polycristallin homogénéisé en β .

Le modèle homogénéisé permet ainsi de reproduire avec précision le comportement mécanique de la tôle de tantale durant le procédé de mise en forme. Un bon accord est observé entre les simulations et les données expérimentales, notamment en ce qui concerne l'évolution de l'épaisseur le long de la pièce et les champs de déformation. Ces résultats confirment donc la capacité du modèle homogénéisé à prédire le comportement mécanique macroscopique de la tôle de tantale au cours du procédé de mise en forme en prenant en compte les effets dus à la microstructure.

Bibliographie

[1] Frénois, S., E. Munier, X. Feaugas, et P. Pilvin. « A Polycrystalline Model for Stress-Strain Behaviour of Tantalum at 300 K ». *Le Journal de Physique IV* 11, no PR5 (septembre 2001): Pr5-301-Pr5-308. <https://doi.org/10.1051/jp4:2001537>.

[2] Colas, Damien, Eric Finot, Sylvain Flouriot, Samuel Forest, Matthieu Mazière, and Thomas Paris. « Local Ratcheting Phenomena in the Cyclic Behavior of Polycrystalline Tantalum ». *JOM* 71, no 8 (2019): 2586-99. <https://doi.org/10.1007/s11837-019-03539-z>.

[3] Lim, Hojun, Jay D. Carroll, Joseph R. Michael, Corbett C. Battaile, Shuh Rong Chen, and J. Matthew D. Lane. « Investigating active slip planes in tantalum under compressive load: Crystal plasticity and slip trace analyses of single crystals ». *Acta Materialia* 185 (2020): 1-12. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.11.030>.

Mots-clés : Plasticité cristalline, Tantale, Mise en forme, Eléments finis, Homogénéisation

Plasticité cristalline et maclage par approche champ de phase : Application aux polycristaux HCP

Jean-Lin DEQUIEDT^{a,b}, Christophe DENOUAL^{a,b}, Ronan MADEC^{a,b}, Nicolas BRUZY^{a,b}

^a CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

^b Université Paris-Saclay, CEA, LMCE, F-91680 Bruyères-le-Chatel, France

La déformation plastique des monocristaux métalliques est assurée par l'activation de plans de glissement favorablement orientés par rapport au chargement. Certaines structures cristallines accommodent également la déformation par du maclage. Un modèle de plasticité cristalline s'appuyant sur la physique aux plus petites échelles a été élaboré et amélioré de façon continue au CEA/DAM depuis une vingtaine d'années. Il est intégré dans le code de simulation Coddex qui a été développé à cette fin et permet de caractériser la réponse de monocristaux et d'agrégats à des chargements donnés. On présente ici le cas de polycristaux de béryllium HCP dont différentes familles de plans de glissement s'activent plus ou moins facilement, ce qui confère au monocristal une réponse très anisotrope. La matrice d'interaction entre systèmes de glissement, qui contrôle l'écroissage a été évaluée par des calculs de Dynamique des Dislocations [1,2]. Les simulations montrent que le nombre de systèmes de glissement pris en compte joue un rôle essentiel dans la réponse moyenne de l'agrégat et la répartition des déformations à l'échelle des grains. Une texture de fibre très marquée peut également avoir une forte incidence. Le maclage est modélisé comme un cas particulier de transformation de phase displacive au moyen d'une approche champ de phase par chemin de réaction [3]. Dans le cas du béryllium, le système de maclage $\{10\bar{1}2\}\langle\bar{1}011\rangle$ s'active facilement mais accommode une déformation modérée ; son effet est toutefois sensible sur la courbe de réponse de l'agrégat.

[1] Madec, R., Kubin, L., 2017. Dislocation strengthening in FCC metals and in BCC metals at high temperatures. *Acta Mater.*, 126, 166-173.

[2] Lorne, Q., 2016. Etude de l'écroissage des métaux hexagonaux par Dynamique des Dislocations. Rapport de stage de l'Université de Technologie de Troyes.

[3] Bruzy, N., Denoual, C., Vattré, A., 2022. Polyphase crystal plasticity for high strain rate: application to twinning and retwinning in tantalum. *J. Mech. Phys. Solids*, 166, 104921.

Résumé pour la présentation du séminaire :

Caractérisation et simulation CPFEM du comportement en fatigue dwell de l'alliage de titane TA6V

Par Widad ABLA

En 2017, un Airbus A380 a subi une rupture prématurée du disque de soufflante de l'un de ses moteurs en vol. Cet accident a été associé à la sensibilité du TA6V, l'alliage utilisé pour la fabrication du disque, au phénomène de fatigue avec temps de maintien (*dwell fatigue*). Ce mécanisme est lié à des phénomènes de fluage à froid ainsi qu'à la présence de régions microtexturées (*Microtextured Regions*, MTR) et de certaines caractéristiques microstructurales susceptibles de provoquer des hétérogénéités locales de déformation et des concentrations de contraintes, conduisant à un abatement de la durée de vie des disques en service. Le matériau étudié est un alliage biphasé constitué d'une phase β de structure cubique centrée (BCC) et d'une phase α de structure hexagonale compacte (HCP). Il présente une microstructure bimodale, obtenue à partir de procédés thermomécaniques complexes, conduisant à la formation de lamelles α/β ainsi que de globules de phase α . La phase α étant majoritaire, elle gouverne en grande partie le comportement mécanique du matériau et sera ainsi la seule phase qui fera l'objet de notre étude. L'anisotropie cristallographique de cette phase peut conduire à certaines configurations microstructurales critiques. Par exemple, la configuration dite grain mou / grain dur correspond à deux grains voisins dont les axes c de la phase α sont perpendiculaires. Une autre configuration importante est celle des joints de grains de torsion basale (JGTB), où deux grains voisins possèdent des axes c parallèles. Par ailleurs, les MTR sont définies comme des agrégats millimétriques de grains de phase α présentant des orientations cristallographiques similaires.

L'objectif de cette étude est d'établir un lien entre la microstructure, les MTR et le comportement ainsi que la durée de vie du TA6V en fatigue *dwell*. Les travaux menés dans cette thèse explorent les effets de différents paramètres microstructuraux, tels que la configuration grains mous / grains durs, les JGTB, les proportions des phases α globulaire et α lamellaire ainsi que leurs tailles. Par ailleurs, les aspects liés aux MTR sont également étudiés, notamment leur taille, orientation et morphologie. L'objectif est d'identifier des indicateurs pertinents de fatigue *dwell* et d'utiliser ces résultats pour calibrer un modèle d'endommagement du TA6V.

La plupart des modèles actuellement disponibles n'étant pas adaptés à la simulation de la fatigue *dwell*, une large base de données expérimentales fournie par Safran Aircraft Engines et l'Institut Pprime, comprenant des essais de traction, de fatigue, de fluage, de relaxation et de fatigue *dwell*, a été utilisée pour identifier des lois de comportement

phénoménologiques macroscopiques et des modèles de plasticité cristalline capables de reproduire le comportement du TA6V à température ambiante, notamment l'effet de *cold dwell*.

Dans ce cadre, des premiers calculs par éléments finis en plasticité cristalline ont été réalisés pour simuler des essais de fatigue et de fatigue *dwell* à deux niveaux de contrainte sur des agrégats polycristallins générés à partir de tessellations de Voronoï. Ces simulations visent à explorer l'influence du chargement, en particulier du temps de maintien et du niveau de contrainte, sur des grandeurs locales telles que le glissement cumulé ou la contrainte de cisaillement.

Enfin, des mesures de déformation *in situ* ont été réalisées lors d'essais de fatigue *dwell* à la ligne SALSA de l'Institut Laue-Langevin à Grenoble, dans l'objectif de valider les prédictions du modèle de plasticité cristalline développé dans cette étude.

Caractérisation 4D de la propagation de fissures courtes de fatigue dans l'Inconel 718

Louis METAYER¹, Aldo MARANO¹, Charles BIANCHETTI¹, Charles ROMAIN², Haixing FANG², Wolfgang LUDWIG², Henry PROUDHON²

¹DMAS, ONERA, Université Paris Saclay, F-92320 Châtillon, FRANCE

²MAT-Centre des Matériaux, MINES Paris, Université PSL, 78000 Versailles, FRANCE

³Id11, ESRF, 38000 Grenoble, FRANCE

Mots clés : Fatigue, Tomographie rayons-X, Caractérisation 4D, Fissures courtes, Inconel 718

La fatigue des matériaux correspond à l'endommagement progressif des matériaux soumis à des chargements mécaniques répétés. Cet endommagement conduit à l'amorçage d'une fissure, puis à sa propagation jusqu'à la rupture. En aéronautique, la fatigue est à l'origine de la moitié des défaillances en services des composants [1]. Parmi les éléments concernés, les disques de turbines subissent des sollicitations répétées au cours des cycles de fonctionnement des moteurs. L'Inconel 718, utilisé pour la fabrication de ces pièces, est ainsi exposé aux mécanismes d'endommagement par fatigue. Dans les matériaux polycristallins, les fissures amorcent et propagent initialement à une échelle comparable à celle des grains. Les mécanismes associés à l'amorçage et à la propagation de ces fissures microstructuralement courtes sont, entre autres, gouvernés par l'hétérogénéité microstructurale [2]. Cette dépendance à la microstructure, associée à l'échelle considérée, complique la caractérisation précise des phénomènes en jeu. La compréhension limitée de ces mécanismes conduit ainsi à l'utilisation de modèles particulièrement conservateurs pour le dimensionnement en fatigue des pièces d'aéronefs. Dans ce contexte, la présente étude vise à améliorer la caractérisation et la compréhension des mécanismes d'amorçage et de propagation des fissures de fatigue microstructuralement courtes, dans l'Inconel 718.

Les techniques d'imagerie par rayons-X au synchrotron permettent aujourd'hui de caractériser : l'endommagement par fatigue, la microstructure, et les déformations élastiques locales d'un matériau [3]. Ces mesures sont réalisées en 3 dimensions avec une résolution spatiale submicronique. Des travaux récents exploitent ces techniques pour identifier et suivre l'amorçage et la propagation de fissures au sein de la microstructure [4].

La présente étude se distingue en proposant un protocole de caractérisation conjointe de l'évolution de l'endommagement par fatigue, de la microstructure, et des déformations élastiques locales. Ce protocole repose sur le couplage des techniques synchrotron avec des essais de fatigue *in situ* réalisés sur une éprouvette d'Inconel 718 sans pré-entaille. L'objectif est d'établir un lien physique direct entre endommagement par fatigue, microstructure et déformations élastiques locales. Afin d'améliorer la compréhension des mécanismes d'amorçage et de propagation des fissures microstructuralement courtes.

Dans le cadre de cette étude, les essais de fatigue *in situ* ont été conduits au synchrotron européen de Grenoble, sur la ligne ID11. L'amorçage et la propagation de fissures microstructuralement courtes ont été caractérisés via tomographie par contraste de phase [5]. La morphologie et

l'orientation des grains ont été caractérisés via tomographie par contraste de diffraction, avec un détecteur en champ proche [6]. Contrairement aux déformations élastiques locales, qui ont été caractérisées via diffraction 3D des rayons-X, à l'aide d'un détecteur en champ lointain plus sensible à la déformation de la maille cristalline [7, 8]. Ces 3 techniques ont été appliquées à plusieurs reprises lors des essais de fatigue. Le développement d'une procédure d'alignement a permis la mise en relation des résultats issus de ces différentes modalités de mesures. L'approche choisie s'appuie sur la détection de l'endommagement par traitement d'images, et sur des méthodes de corrélation volumique numérique.

La reconstruction des résultats de tomographie par contraste de phase permet de détecter des fissures dès quelques micromètres de longueur. A partir de ces observations, la quantification des durées d'amorçage permet d'établir la chronologie de l'endommagement par fatigue. Plusieurs fissures amorcent au sein d'une même éprouvette, avec des durées différentes. L'apport des données microstructurales permet de positionner les sites d'amorçage au sein de la microstructure. Les résultats mettent en évidence des mécanismes d'amorçage distincts, qui conduisent à l'apparition des multiples fissures à différents endroits de la surface d'une même éprouvette (**Fig. 1**). Les sites d'amorçage identifiés sont : intragranulaire, au niveau d'un joint de macle, sur une inclusion fissurée, et au niveau d'une rugosité de surface.

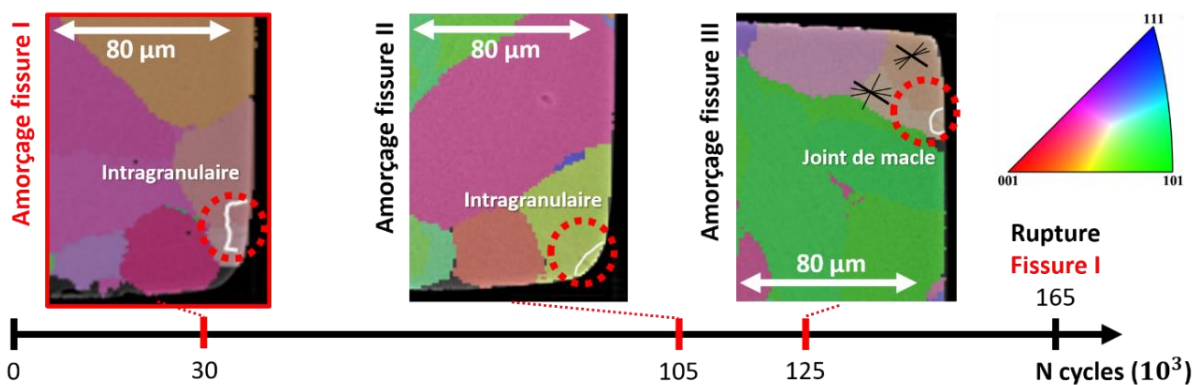


Fig. 1 : Chronologie de l'endommagement par fatigue d'une éprouvette jusqu'à sa rupture. Le premier cycle détecté est tracé en blanc. L'orientation cristallographique des grains est donnée via la norme des figures de pôle inverses selon l'axe de chargement de l'éprouvette.

Le suivi de la propagation des fissures permet de projeter les fronts de fissures sur la microstructure. Cette projection met en évidence des arrêts locaux de plusieurs dizaines de milliers de cycles au niveau d'obstacles microstructuraux (**Fig. 3**). Ces obstacles provoquent aussi des bifurcations de la trajectoire de propagation des fissures. Ces observations montrent que la présence d'obstacles microstructuraux influence et entrave la propagation des fissures de fatigue.

L'alignement des mesures de diffraction 3D des rayons-X avec les deux autres modalités permet de caractériser la déformation élastique en pointe de fissure. Les résultats obtenus mettent en évidence un gradient de la déformation élastique au voisinage immédiat de la fissure (**Fig. 2**). Cette mesure constitue une première mondiale.

Ces résultats permettent d'établir un lien entre les mécanismes d'amorçage et de propagation et les données microstructurales et mécaniques. La cinétique et les trajectoires de propagation sont mises en relation avec la distance aux joints de grain, l'orientation cristallographiques, la désorientation intergranulaire et les déformations élastiques internes.

La confrontation de ces mesures entre elles ouvre la voie à l'identification de paramètres physiques pertinents, susceptibles d'améliorer la description et la modélisation des mécanismes d'amorçage et de propagation des fissures.

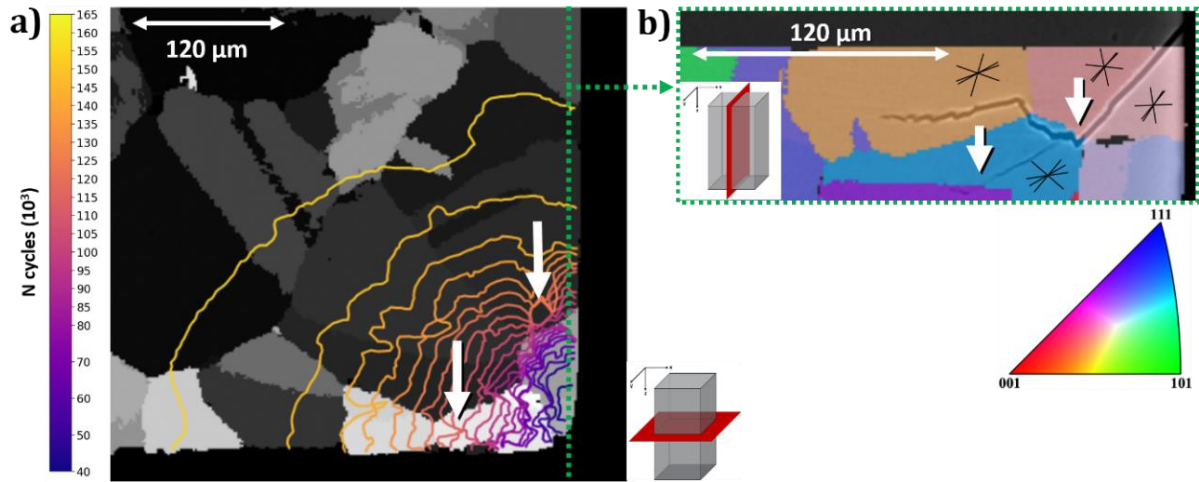


Fig. 3 : Chronologie de la propagation d'une fissure de fatigue jusqu'au cycle précédant la rupture. Les points d'arrêt ou de bifurcation de la fissure sont indiqués en blanc. a) Les fronts de fissure sont projetés sur une coupe transverse de la cartographie des grains. b) Une coupe longitudinale du cycle précédant la rupture montre la trajectoire de la fissure au sein de la microstructure. L'orientation cristallographique des grains est donnée via la norme des figures de pôle inverses selon l'axe de chargement de l'éprouvette. Les plans de glissement principaux des grains traversés sont représentés en noir.

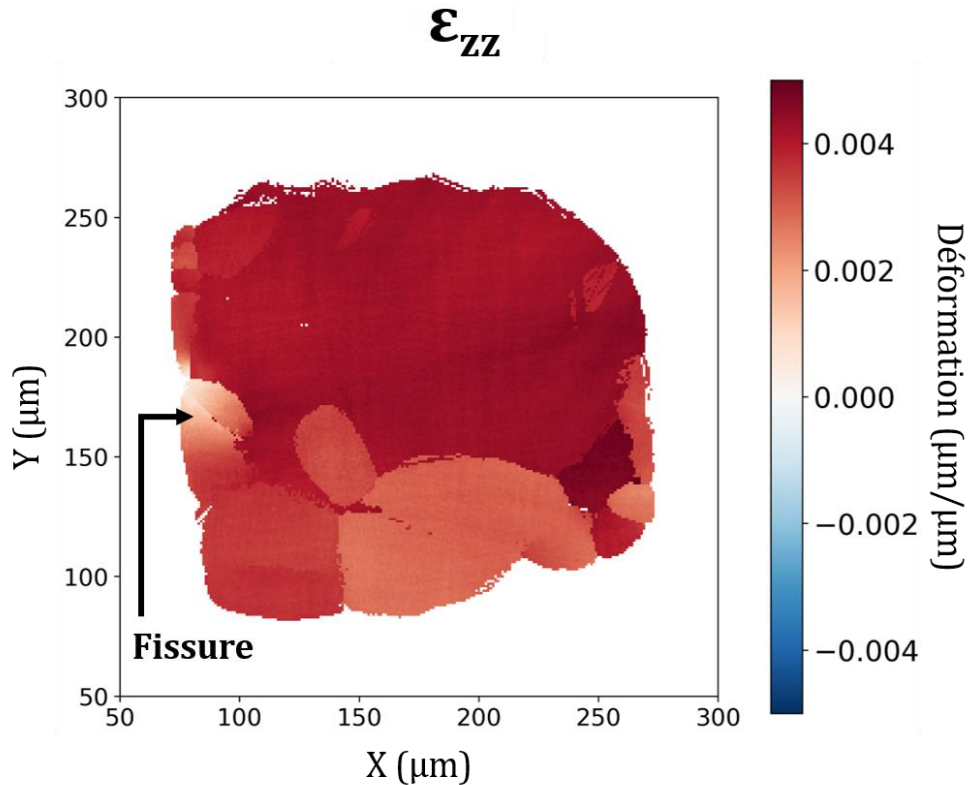


Fig. 2 : Mesure du champ de déformation élastique par diffraction 3D des rayons-X.

Références :

- [1] S. J. Findlay et N. D. Harrison, « Why aircraft fail », *Materials Today*, vol. 5, n° 11, p. 18-25, nov. 2002, doi: 10.1016/S1369-7021(02)01138-0.
- [2] M. D. Sangid, « The physics of fatigue crack propagation », *International Journal of Fatigue*, vol. 197, p. 108928, août 2025, doi: 10.1016/j.ijfatigue.2025.108928.
- [3] C. Ribart, A. King, W. Ludwig, J. P. C. Bertoldo, et H. Proudhon, « In situ synchrotron X-ray multimodal experiment to study polycrystal plasticity », *J Synchrotron Rad*, vol. 30, n° 2, Art. n° 2, mars 2023, doi: 10.1107/S1600577522011705.
- [4] V.-D. Le *et al.*, « Synchrotron X-ray 3D characterisation of fatigue crack initiation during in-situ torsion cyclic tests », *International Journal of Fatigue*, vol. 193, p. 108762, avr. 2025, doi: 10.1016/j.ijfatigue.2024.108762.
- [5] M. Herbig *et al.*, « 3-D growth of a short fatigue crack within a polycrystalline microstructure studied using combined diffraction and phase-contrast X-ray tomography », *Acta Materialia*, vol. 59, n° 2, p. 590-601, janv. 2011, doi: 10.1016/j.actamat.2010.09.063.
- [6] W. Ludwig *et al.*, « Three-dimensional grain mapping by x-ray diffraction contrast tomography and the use of Friedel pairs in diffraction data analysis », *Review of Scientific Instruments*, vol. 80, n° 3, p. 033905, mars 2009, doi: 10.1063/1.3100200.
- [7] H. F. Poulsen, « An introduction to three-dimensional X-ray diffraction microscopy », *J Appl Crystallogr*, vol. 45, n° 6, p. 1084-1097, déc. 2012, doi: 10.1107/S0021889812039143.
- [8] N. A. Henningsson, S. A. Hall, J. P. Wright, et J. Hektor, « Reconstructing intragranular strain fields in polycrystalline materials from scanning 3DXRD data », *J Appl Crystallogr*, vol. 53, n° 2, p. 314-325, avr. 2020, doi: 10.1107/S1600576720001016.