

Proposition de sujet de thèse – 2019

LEM3 (Laboratoire d'étude des microstructures et de mécanique des matériaux)

Modélisation micromécanique à variables internes du comportement élastoviscoplastique non linéaire anisotrope des matériaux hétérogènes, applications aux polycristaux métalliques

Mots clés : Comportement élastoviscoplastique, approche micromécanique, variables internes, homogénéisation

Equipe d'Accueil : Axe 2 du département IMPACT (Ingénierie des Microstructures, Procédés, Anisotropie, Comportement) du LEM3 (UMR CNRS 7239)

École doctorale : ED C2MP : Chimie, Mécanique, Matériaux, Physique

Financement : allocation ministérielle 100%

Directeur de thèse : Dr HDR Florence Dinartz, florence.dinartz@univ-lorraine.fr, 03 72 74 86 66

Co-directeur de thèse : Pr Hafid Sabar, hafid.sabar@univ-lorraine.fr

Description du Sujet:

L'allègement des structures combiné à l'amélioration des propriétés microstructurales des matériaux constitue un verrou scientifique incontournable. La prédiction des propriétés des alliages complexes repose sur des modélisations multi-échelles qui prennent en considération le caractère multiphysique du comportement des structures métalliques afin de mieux comprendre les processus mis en jeu tout au long des procédés métallurgiques. Ainsi de la mise en œuvre par des procédés novateurs jusqu'au comportement lors des applications finales visées, toutes les caractéristiques mécaniques doivent être évaluées à l'aulne de leur résistance mécanique, leur formabilité et leur durabilité.

Le principal objectif est d'établir des relations entre l'organisation de la texture (sous forme de polycristaux ou de microtextures complexes) et les propriétés mécaniques ainsi que de leur évolution. L'amélioration des propriétés s'obtient par affinement de la taille de grain, par transformation de phase induite mécaniquement, par texturation complexe. Les pistes d'investigation reviennent souvent à proposer un multiphasage des matériaux. La modélisation multi-échelles du comportement de matériaux hétérogènes devient une étape indispensable lors de préconisations d'optimisation des matériaux complexes. En effet, certains matériaux, tels le titane utilisé en aéronautique, comportent des phases multiples dont les tailles varient d'un facteur cent. La structure de tels matériaux peut rester très hétérogène malgré des procédés de mise en œuvre raffinés (corroyage élevé pour les composants forgés et fabrication additive utilisant des poudres). Ces matériaux présentent une anisotropie d'origine cristalline directement corrélée à l'orientation cristallographique et morphologique des grains. Le comportement en fluage est également fortement impacté par l'anisotropie de comportement des différentes phases de l'alliage.

La spécificité du comportement des nouveaux matériaux (fluage, relaxation, ...) réside essentiellement dans la contribution simultanée de composante élastique instantanée de la déformation et de composante visqueuse dépendante de la vitesse de déformation. L'étude de l'hétérogénéité du matériau se voit alors compliquée par le caractère héréditaire du comportement induisant un couplage espace-temps qui provoque des interactions mécaniques différées entre les constituants du matériau. Deux familles de démarche ont été développées : les approches héréditaires basées sur le principe de correspondance avec un problème symbolique élastique (Mandel, 1966 ; Rougier, 1993 ; Masson, 1999), les méthodes à variables internes qui considèrent que l'histoire du chargement est contenue dans son état interne. Dans le cadre des approches héréditaires, les propriétés globales des matériaux multiphasiques sont obtenues directement dans l'espace de Laplace-Carson. La dépendance temporelle du comportement global est obtenue par une méthode d'inversion de la transformation de Laplace-Carson généralement coûteuse en temps de calculs. Seuls des cas particuliers dédiés aux matériaux isotropes à viscoélasticité linéaire et à inclusions sphériques admettent des solutions analytiques simples (Christensen 1969, Laws et McLaughlin 1978). Les approches à variables internes trouvent leurs origines dans les tentatives de Weng (1981) sur l'assimilation de la déformation visqueuse en une déformation libre, rompant ainsi le couplage entre les variables d'espace et de temps. Devant la surestimation des contraintes induites par cette méthode, Lahellec et Suquet (2007) ont développé

une approche de variable interne de type variationnelle utilisant une discrétisation implicite du temps. Ricaud et Masson (2009) ont mis au point une approche à variables internes inspirée de la décomposition en série de Prony liée à la fonction de relaxation effective. Les approches actuelles peuvent être vues comme une extension de la méthode développée par Rougier et al (1994) pour un comportement non linéaire. En se basant sur l'étude des comportements asymptotiques du matériau (élastique aux petites déformations et visqueux aux grandes déformations), Paquin et al. (1999) et Sabar et al. (2002) écrivent une équation intégrale simplifiée par introduction d'opérateurs de projection de Kunin (1983) aboutissant ainsi à la caractérisation de deux milieux de référence : élastique et visqueux. Cette démarche repose sur un traitement 'symétrique' des composantes élastiques et visqueuses du comportement. Le modèle des champs translatsés (Sabar et al., 2002) repose sur une démarche similaire mais appliquant une translation des champs uniquement sur la déformation viscoplastique non uniforme, le milieu de référence élastique provenant de l'approximation autocohérente en élasticité. Récemment, Coulibaly et Sabar (2011) ont proposé une nouvelle équation intégrale décrivant le couplage viscoélastique en introduisant de façon simultanée des tenseurs d'Eshelby élastiques et visqueux. Le problème a été traité pour un comportement viscoélastique linéaire puis viscoélastique non linéaire par les méthodes classiques de linéarisation. Cette approche prometteuse a été étendue aux composites à enrobages multiples en utilisant des opérateurs interfaciaux élastiques et visqueux (Dinzart et Sabar, 2014,[1]). Les résultats obtenus coïncident avec les solutions exactes dans le cas de schéma auto-cohérent généralisé. Berbenni et al. (2015,[2,3]) ont réinterprété cette approche incrémentale en montrant que la contribution volumique de l'équation intégrale s'exprime uniquement en fonction de la contrainte hydrostatique moyenne à laquelle sont liées les variables internes.

Le sujet de thèse consiste à développer une nouvelle approche micromécanique à variables internes en élastoviscoplasticité en prenant en compte les propriétés anisotropes du matériau (anisotropies d'origine élastique et plastique ou viscoplastique) pour des applications à des polycristaux métalliques d'alliages complexes fortement texturés ou micro-texturés. Les applications concernent les nouveaux alliages de Ti (alpha-beta) et nouveaux aciers (type Fent-TiB2) étudiés au sien du département IMPACT du LEM3. Ce sujet sera développé dans l'axe 2 du département IMPACT en interaction avec les axes 1 et 3 pour les applications.

L'équipe de recherche encadrante a développé une nouvelle approche micromécanique à variables internes qui a donné des résultats performants en viscoélasticité isotrope. Son extension en élastoviscoplasticité anisotrope est envisagée dans la thèse pour arriver à une nouvelle approche micromécanique donnant des prédictions plus précises dans la description des champs de déformation et contrainte dans les grains des alliages polycristallins. Les résultats du modèle seront comparés avec des simulations numériques obtenus par une approche à champs complets basée sur une méthode d'homogénéisation périodique menée dans l'espace de Fourier (Fast Fourier Transform) récemment développée au LEM3 [4,5,6]. Cette méthode numérique permettra la validation du modèle à variables internes pour des comportement plus ou moins anisotropes conduisant de façon exacte aux champs de contrainte et de déformation dans chaque phase et au comportement effectif (global) du polycristal à partir des images de microstructures expérimentales provenant d'études parallèles dans le département IMPACT du LEM3. Le comportement de différents matériaux polycristallins sera étudié à la lumière des simulations pour différents chargements mécaniques (traction, fluage et sollicitations cycliques) en relation avec des résultats expérimentaux. De plus, les effets du caractère multi-phasé, de la texture cristallographique et de la morphologie des grains seront étudiés à l'aide d'un nouveau modèle auto-cohérent élasto-viscoplastique développé dans cette thèse qui pourra améliorer grandement la prédiction des contraintes internes par rapport à d'autres approches antérieures. Les prédictions des contraintes moyennes et des rotations cristallines par grain seront validées par des mesures par diffraction RX et par des mesures EBSD (MEB) haute résolution. Les simulations numériques seront eux aussi comparées aux mesures expérimentales, ce qui devrait permettre de révéler les interfaces qui favorisent l'initiation et la propagation des fissures et d'en expliquer les raisons mécaniques.

- [1] Florence Dinzart, Hafid Sabar. Homogenization of the viscoelastic heterogeneous materials with multi-coated reinforcements: an internal variables formulation. *Arch. Appl. Mech.* 84:715-730, 2014.
- [2] Stéphane Berbenni, Florence Dinzart, Hafid Sabar. A new internal variables homogenization scheme for linear viscoelastic materials based on an exact Eshelby interaction law. *Mechanics of Materials* 81, 110-124, 2015.
- [3] Stéphane Berbenni, Hafid Sabar. A Time-Incremental Eshelby-Based Homogenization Scheme for Viscoelastic Heterogeneous Materials (Chapter 12). In: "Micromechanics and Nanomechanics of Composite Solids" (Editors: Shaker A. Meguid, George J. Weng), ISBN 978-3-319-52793-2. Springer, pp. 347-369, 2017
- [4] Stéphane Berbenni, Vincent Taupin, Komlan Sénam Djaka, Claude Fressengeas. A numerical FFT spectral approach for solving elasto-static field dislocation and g-disclination mechanics. *International Journal of Solids and Structures*. Vol. 51, pp. 4157-4175, 2014
- [5] Komlan S. Djaka, Aurélien Vilani, Vincent Taupin, Laurent Capolungo, Stéphane Berbenni. Field Dislocation Mechanics for heterogeneous elastic materials: A numerical spectral approach. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 315, 921-942, 2017

[6] Komlan S. Djaka, Stéphane Berbenni, Vincent Taupin, Ricardo A. Lebensohn. Mesoscale Field Dislocation Mechanics solved by EVP-FFT: application to channel-type microstructures and polycrystals. En préparation, 2018

Description of the subject:

With the growing concerns on energy conservation, lightweight engineering structures and improvement of the microstructural properties of materials has become key scientific problems. The properties prediction of complex alloys is based on multiscale modeling that takes into account the multiphysical behavior of metallic structures to better understand the processes involved in metallurgical processes. Thus, from the implementation by innovative processes to the behavior in the final applications, all the mechanical characteristics must be evaluated by virtue of their mechanical strength, their formability and their durability.

The main objective is to establish relationships between the texture organization (polycrystals or complex microtextures) and the mechanical properties and their evolution. The improvement of the properties is obtained by refinement of the grain size (Hall-Petch effect), by mechanically induced phase transformation or by complex texturing. The lines of investigation often come down to proposing a multiphase of materials. Multi-scale modeling of the behavior of heterogeneous materials becomes an essential step in optimization recommendations for complex materials.

Indeed, some materials, such as titanium used in aeronautics, have multiple phases whose sizes vary by a factor of one hundred. The structure of such materials can remain very heterogeneous despite refined processing methods (high wrought for forged components and additive manufacturing using powders, gradient microstructures,). These materials exhibit anisotropy of crystalline origin directly correlated to the crystallographic and morphological orientation of the grains. The creep behavior is also strongly impacted by the anisotropy of the behavior of the different phases of the alloy.

The specificity of the behavior of these new materials (creep, relaxation, ...) resides essentially in the simultaneous contribution of instantaneous elastic component of the deformation and of the viscous component dependent on the strain rate. The study of the heterogeneity of the material is then complicated by the hereditary character of the behavior inducing a space-time coupling which causes delayed mechanical interactions between the constituents of the material. Two families of approaches have been developed: hereditary approaches based on the principle of correspondence with an elastic symbolic problem (Mandel, 1966) and internal variable methods which consider that the history of loading is contained in its internal state.

In the context of hereditary approaches, the global properties of multiphase materials are obtained directly in the Laplace-Carson space. The temporal dependence of the global behavior is obtained by a method of inversion of the Laplace-Carson transformation that is generally expensive in computation time. Only particular cases of isotropic materials with linear viscoelasticity and spherical inclusions admit simple analytical solutions (Christensen 1969, Laws and McLaughlin 1978). Internal variable approaches have their origins in Weng's (1981) attempts to assimilate viscous strain into eigenstrain, thus breaking the coupling between space and time variables. Given the overestimation of the stress induced by this method, Lahellec and Suquet (2007) developed an internal variable approach based on variational scheme using an implicit discretization of time. Ricaud and Masson (2009) have developed an internal variable approach inspired by the Prony series decomposition related to the effective relaxation function. Current approaches can be seen as an extension of the method developed by Rougier et al (1994) for nonlinear behavior. Based on the study of the asymptotic behavior of the material (elastic for small strain and viscous for large strain), Paquin et al. (1999) and Sabar et al. (2002) wrote a simplified integral equation by introducing Kunin projection operators (1983), thus leading to the characterization of two reference media: elastic and viscous. This approach is based on a 'symmetrical' treatment of the elastic and viscous components of the behavior. The model of the translated fields (Sabar et al., 2002) is based on a similar approach but applying a translation of the fields only on non-uniform viscoplastic deformation, the elastic reference medium coming from the self-elasticity approximation in elasticity. An affine extension of Paquin et al. (1999) was proposed in Berbenni and Capolungo (2015) and Mareau and Berbenni (2015), for the Mori-Tanaka and self-consistent approaches, respectively.

Recently, Coulibaly and Sabar (2011) proposed a new integral equation describing viscoelastic coupling by simultaneously introducing elastic and viscous Eshelby tensors. The problem was treated for linear viscoelastic and nonlinear viscoelastic behavior by conventional linearization methods. This promising approach has been extended to composites with multi-coated reinforcements by using elastic and viscous interfacial operators (Dinzart and Sabar, 2014, [1]). The results obtained coincide with the exact solutions in the case of generalized self-consistent scheme. Berbenni et al. (2015, [2,3]) have reinterpreted this incremental approach by showing that the volume contribution of the integral equation is expressed solely as a function of the average hydrostatic stress to which the internal variables are linked.

The thesis subject is to develop a new micromechanical approach with internal variables in elastoviscoplasticity taking into account the anisotropic properties of the material (anisotropies of elastic and plastic or viscoplastic origin) for applications to metallic polycrystals of highly textured complex alloys or micro-textured. The applications concern new alloys of Ti

(alpha-beta) and new steels (Fent-TiB₂ type) studied in the IMPACT department of LEM3. This subject will be developed in axis 2 of the IMPACT department in interaction with axes 1 and 3 for applications.

The supervising research team has developed a new micromechanical approach with internal variables that has given powerful results in isotropic viscoelasticity. Its extension in anisotropic elastoviscoplasticity is considered in the thesis to achieve a new micromechanical approach giving more precise predictions in the description of strain and stress fields in the grains of polycrystalline alloys. The results of the model will be compared with numerical simulations obtained by a full field approach based on a periodic homogenization method conducted in the Fourier (Fast Fourier Transform) space recently developed at LEM3 [4,5,6]. This numerical method will allow the validation of the internal variable model for more or less anisotropic behavior, leading exactly to the stress and strain fields in each phase and to the (global) effective behavior of the polycrystal from experimental microstructure images from parallel studies in the IMPACT department of LEM3. The behavior of different polycrystalline materials will be studied in the light of simulations for different mechanical loads (traction, creep and cyclic loading) in relation with experimental results. In addition, the effects of multiphase character, crystallographic texture and grain morphology will be studied using a new self-consistent elasto-viscoplastic model developed in this thesis that can greatly improve the stress prediction compared to other previous approaches. The predictions of average stresses and crystal grain rotations will be validated by X-ray diffraction measurements and high resolution EBSD (SEM) measurements. Numerical simulations will also be compared with experimental measurements, which should reveal the interfaces that favor the initiation and propagation of cracks and explain their mechanical reasons.

Profil du candidat :

Le(a) doctorant(e) devra avoir suivi un cursus intégrant la mécanique des milieux continus et la mécanique des matériaux. Le sujet de thèse ayant trait à la modélisation du comportement par homogénéisation, il est fortement souhaité que le(a) doctorant(e) ait des compétences dans les approches mathématiques et analytiques et/ou qu'il(elle) ait déjà suivi un module d'homogénéisation du comportement mécanique en mécanique des matériaux. Le(a) doctorant(e) devra maîtriser un code de calcul formel et pouvoir implémenter des éléments pour résoudre un problème par la méthode des différences finies.

Le(a) doctorant(e) devra être titulaire d'un master II (ou équivalent) avec une moyenne des disciplines scientifiques supérieure à 12 en master I (ou équivalent) et 13 en master II (ou équivalent). Une bonne expression écrite en français et en anglais est souhaitée. Le(a) candidat(e) présentera une lettre de motivation de minimum deux pages jointe au dossier.

The PhD student must have followed a course on mechanics of continuous media and mechanics of materials. As the subject of the thesis is related to homogenization behavior modeling, it is strongly desired that the doctoral student have skills in mathematical and analytical approaches and / or that he or she has already followed a course on the homogenization of the mechanical behavior in mechanics of materials. The PhD student will manipulate computer algebra and be able to implement elements to solve a problem using the finite difference method.

The PhD student must hold a Master of Science II (or equivalent) with an average of scientific disciplines greater than 13. A good written expression in French and in English is desired. The candidate will submit a letter of motivation of a minimum of two pages attached to the file.