

# Calculs Éléments Finis à l'échelle des grains depuis des données EBSD

**D. DEPRIESTER, R. KUBLER**

Laboratoire MSMP (EA 7350), École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, 2 cours des Arts et Métiers, 13617 Aix-en-Provence, [dorian.depriester@ensam.eu](mailto:dorian.depriester@ensam.eu), [regis.kubler@ensam.eu](mailto:regis.kubler@ensam.eu)

## Résumé :

*Afin d'étudier le comportement d'un matériau polycristallin à l'échelle de ses grains, des simulations Éléments Finis (EF) tenant compte des propriétés physiques de chacun d'eux peuvent être effectuées. Ces simulations doivent alors tenir compte des hétérogénéités entre phases, des anisotropies locales ainsi que des orientations cristallines des grains. De plus, la morphologie de chaque grain doit être le plus fidèlement représentée dans ces calculs pour tenir compte d'éventuels effets de concentration aux joints de grains.*

*Un algorithme, appelé MTEX2Gmsh, est proposé pour générer automatiquement un maillage EF depuis des données EBSD. Le maillage ainsi obtenu donne une description lisse mais très précise des joints de grains tout en garantissant un nombre modéré de degrés de liberté sur le maillage, donc des temps de calculs réduits.*

*Grâce à cet algorithme, le comportement élastique fragile d'une céramique et les phénomènes de micro-plasticité dans un acier nitruré sont étudiés comme applications. Cette deuxième étude est basée sur un modèle de plasticité cristalline dans la phase ferritique.*

## Abstract:

*For the sake of understanding the behaviour of a polycrystal at its grain scale, Finite Element (FE) numerical simulations can be performed, taking into account the physical properties of each grain. Those simulations must take into account the phase heterogeneities, the local anisotropies and the crystalline orientations as well. In addition, the actual grain morphologies must be well described in order to model localization phenomena.*

*An algorithm, named MTEX2Gmsh, is proposed to automatically generate an EF mesh from EBSD data. The resulting mesh gives smooth and accurate descriptions of the grain boundaries together with reduced Degrees of Freedom (DoF), hence limited computational times.*

*Using this algorithm, the fragile-elastic behaviour of a ceramic and micro-plasticity phenomena in a nitrided steel are studied as application cases. The latter is based on a crystal-plasticity model for the ferrite phase.*

**Mots clefs : EBSD, Éléments Finis, maillage, polycristal, grains**

## 1 Introduction

L'étude du comportement d'une microstructure polycristalline requiert une représentation géométrique adaptée des grains. L'analyse à l'échelle des grains permet d'étudier l'influence de la morphologie des grains et de la texture cristallographique sur le comportement macroscopique. Cette analyse peut être faite par simulation numérique, notamment grâce à la méthode des Éléments Finis (EF). Dans ce cas, celle-ci doit tenir compte des hétérogénéités du matériau (différentes phases) ainsi que des anisotropies locales.

L'analyse en *Electron Back-Scattered Diffraction* (EBSD) est une méthode d'imagerie couramment utilisée pour caractériser la forme des grains et les orientations de ses derniers dans les polycristaux. Elle fournit une carte (généralement 2D) où chaque point renseigne sur la phase correspondante et son orientation cristallographique. Cette dernière est souvent représentée à l'aide des angles d'Euler, notés  $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ , selon la convention de Bunge [1]. Le calcul des désorientations entre pixels voisins permet de déterminer la position et l'orientation des joints de grain. Ainsi, grâce à des algorithmes de reconstruction, il est alors possible de définir chaque grain comme le volume fermé par un ensemble de joints de grains. Bachmann *et al.* [2] utilisent une décomposition de Voronoï pour reconstruire les grains, même si les données EBSD sont incomplètes (par exemple si des points ne sont pas indexés).

De nombreuses solutions existent dans la littérature pour générer numériquement des milieux représentatifs de polycristaux, tels que NEPER [3] ou DREAM.3D [4]. Néanmoins, ces logiciels utilisent des approches statistiques (distribution de taille de grains et texture cristallographique) pour générer les géométries. Ainsi, ce type d'approche pour un calcul EF ne permet pas d'étudier le comportement local du matériau (par exemple au voisinage des joints de grain) ou de comparer les résultats de simulation EF avec des mesures en champ complet, comme l'ont fait par exemple Guery *et al.* [5].

Ce travail propose un outil de représentation numérique d'une microstructure polycristalline à partir de données EBSD 2D, en vue d'un calcul EF. Cet outil vise à représenter la microstructure de la façon la plus fidèle et la plus réaliste possible. La section 2 présente la méthodologie de l'outil développé depuis les logiciels MTEX et Gmsh. Dans la section 3, des applications à des comportements mécaniques de microstructures types sont proposées pour illustrer l'outil de génération de maillage.

## 2 Méthodologie de génération de maillage depuis des données EBSD

L'outil proposé repose sur la méthodologie suivante :

1. reconstruction des grains depuis les données EBSD,
2. définition de la géométrie de chaque grain,
3. maillage des volumes associés à chaque grain,
4. importation du maillage dans un logiciel EF,
5. définition des propriétés mécaniques locales, en fonction de la phase et de l'orientation cristalline,
6. simulation EF.

Les cartographies EBSD ont été traitées avec la toolbox MTEX pour MATLAB [6] pour reconstruire les grains. La figure 1 schématise la procédure proposée ici pour effectuer une simulation EF depuis des données EBSD.

Dans MTEX, un grain est défini comme la surface fermée par un ensemble de joints de grains. Ceux-ci sont définis par des séquences d'arêtes élémentaires. Chacune d'elle, appelée polyligne, est approximée

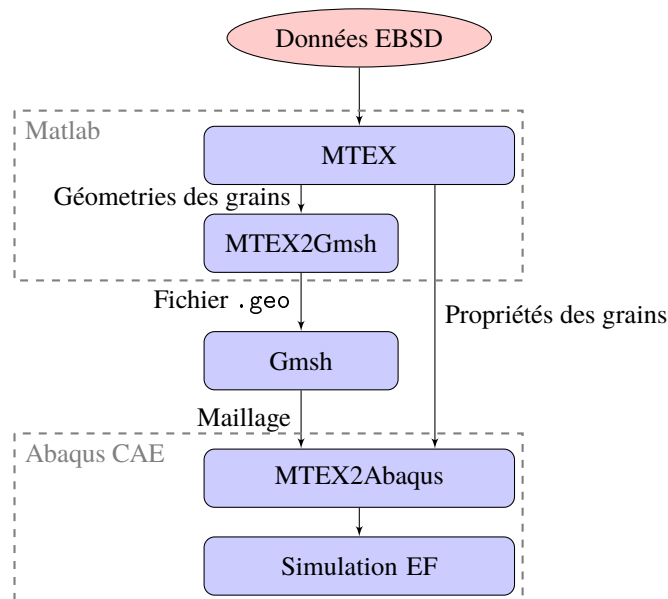


FIGURE 1 – Procédure utilisée pour effectuer une simulation numérique EF depuis des données EBSD. Le fichier `.geo` décrit la géométrie de chaque grain (selon la syntaxe de Gmsh). Les propriétés des grains (phase et orientation cristalline moyenne) sont stockées sous forme tabulaire (fichier CSV).

ici par une Bspline [7] avant maillage. Cette approximation permet de lisser les joints de grain tout en assurant que les points terminaux (donc les joints triples) appartiennent à la courbe et sont donc conservés dans la représentation finale de la géométrie.

Grâce à cette définition des joints de grain, il est possible de définir pour le maillage une taille d'élément fonction de la distance aux joints de grains. Soit  $s(x)$  la taille locale en  $x$ . On impose alors :

$$s(x) = s_0 + k \cdot d_J(x) \quad (1)$$

où  $s_0$  est la taille minimale,  $d_J$  est la distance euclidienne par rapport au plus proche joint de grain et  $k$  un paramètre. Ce gradient de taille d'éléments permet une description très précise des joints de grain tout en limitant le nombre d'éléments dans le maillage.

Cet algorithme de conversion de la description des joints de grain est implémenté dans la toolbox MTEX2Gmsh [8], accessible en ligne<sup>1</sup>. Cette conversion permet ensuite d'utiliser le mailleur Gmsh [9] pour générer le maillage des grains en respectant la contrainte imposée par l'équation (1).

La figure 2 illustre le maillage obtenu depuis les données EBSD d'un silicate (fourni dans la bibliothèque d'exemples de MTEX). Sur cette figure, il apparaît que les joints de grain sont décrits très finement tout en conservant un nombre limité d'éléments (17 020 dans cet exemple). De plus, il est important de noter que le maillage des grains est conforme malgré la présence de grains imbriqués les uns dans les autres.

Une fois importé dans un logiciel EF, il suffit d'affecter à chaque région du maillage la phase et l'orientation cristalline moyenne du grain considéré. Cette étape se fait par lecture d'un fichier tabulé, lui-même généré par MTEX2Gmsh.

1. <https://github.com/DorianDepriester/mtex2Gmsh>

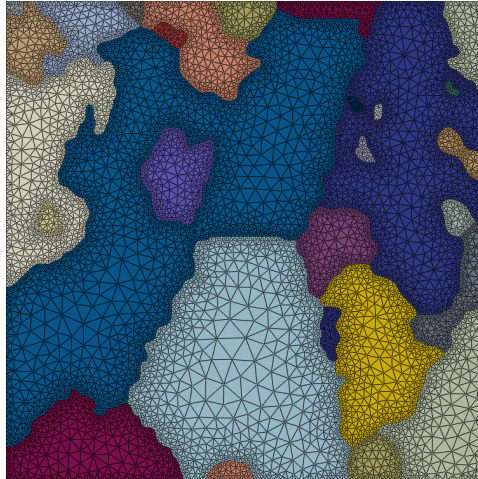


FIGURE 2 – Représentation d'un maillage obtenu depuis les données EBSD d'un silicate.

### 3 Résultats et applications

#### 3.1 Effet de la représentation des joints de grains sur une géométrie modèle

Afin d'évaluer l'influence de la qualité de description des joints de grain sur le comportement mécanique simulé en EF, des simulations de traction simple ont été réalisées depuis des géométries « dégradées » par rapport à celle présentée en figure 2. La figure 3 représente les résultats de ces simulations, en fonction de la qualité de description des joints de grains. Il apparaît qu'une description précise des joints de grain

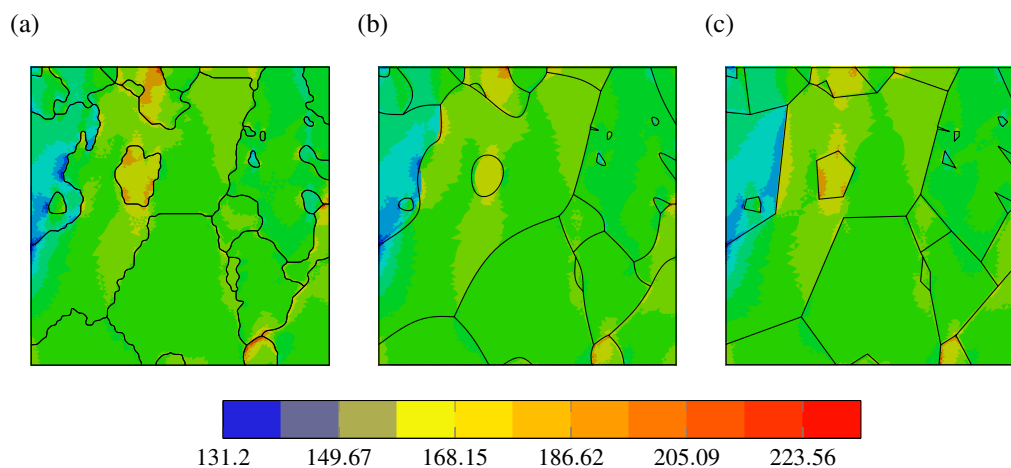


FIGURE 3 – Contrainte de von Mises (MPa) obtenue par simulation EF d'un essai de traction sur (a) la géométrie initiale, comparativement à ceux obtenus depuis des géométries dégradées (b) et (c). Les joints de grain sont représentés en traits noirs.

est nécessaire pour mettre en évidence les gradients d'état de contrainte au sein de chaque grain (voir par exemple les différences de distribution des contraintes dans l'îlot central de la figure 3, selon la qualité des descriptions).

## 3.2 Applications à des simulations de comportement mécanique de microstructures

L'algorithme décrit précédemment a été utilisé pour les études suivantes :

- fissuration d'une céramique,
- comportement élasto-plastique d'une microstructure de nitruration.

### 3.2.1 Fissuration d'un polycristal céramique

L'analyse EBSD d'un échantillon de dioxyde d'uranium ( $\text{UO}_2$ ), issu des travaux de Soulacroix [10], a été utilisée pour la simulation d'un essai de flexion 3 points sur un barreau de dimensions  $500 \times 120 \times 2 \mu\text{m}^3$ . La figure 4 représente la microstructure dans ce barreau en terme d'orientations cristallines.

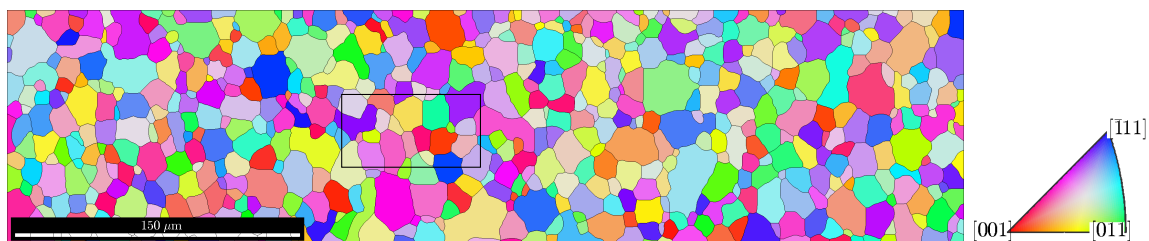


FIGURE 4 – Carte EBSD du dioxyde d'uranium. Le rectangle noir représente la zone de maillage présentée en figure 5.

La figure 5 illustre une partie du maillage obtenu depuis les données EBSD du dioxyde d'uranium. Le

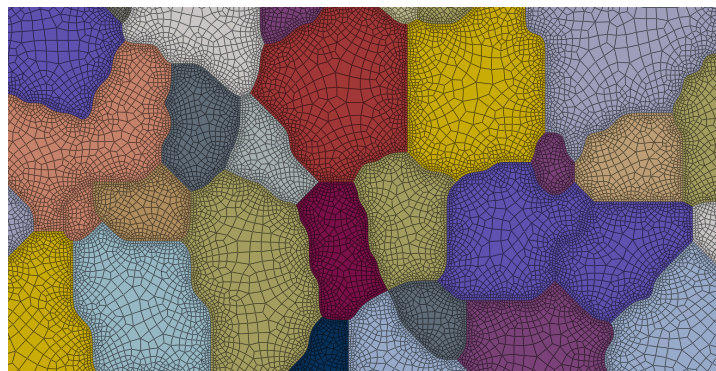


FIGURE 5 – Maillages obtenus depuis les cartes EBSD de l' $\text{UO}_2$ . Seule la région représentée par un rectangle à la figure 4 est illustrée ici.

maillage est composé de 378 119 éléments briques (C3D8) avec un seul élément dans l'épaisseur.

Le dioxyde d'uranium est une céramique monophasée Cubique Face Centrée (CFC). Son comportement à froid ( $T < 1000^\circ\text{C}$ ) est considéré élastique fragile avec fissuration. Le comportement élastique est supposé linéaire dans l'hypothèse des petites perturbations, tel que :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2)$$

avec  $\sigma$  le tenseur des contraintes de Cauchy,  $\varepsilon$  le tenseur de déformation et  $C$  le tenseur des constantes élastiques. Les paramètres d'élasticité utilisés, exprimés dans la base du cristal cubique, sont issues



de la littérature [11] ( $C_{11} = 396 \text{ GPa}$ ,  $C_{12} = 121 \text{ GPa}$  et  $C_{44} = 64.1 \text{ GPa}$  d'après la notation de Voigt) . Dans le modèle, la fissuration est supposée intragranulaire et est simulée à l'aide d'une approche XFEM [12] dans Abaqus avec un critère cohésif sur la contrainte principale maximale. Les paramètres de la loi cohésive linéaire sont : la contrainte maximale  $\sigma^m = 350 \text{ MPa}$  et le déplacement à la rupture  $u^m = 0.0114 \mu\text{m}$  correspondant à un taux de restitution d'énergie  $G_I = 2 \text{ J m}^{-2}$ .

Un essai de flexion 3 points est simulé sur le barreau pré-fissuré comme présenté en figure 6. La région simulée en XFEM est placée au centre du barreau en prolongement de la pré-fissure loin des conditions aux limites.

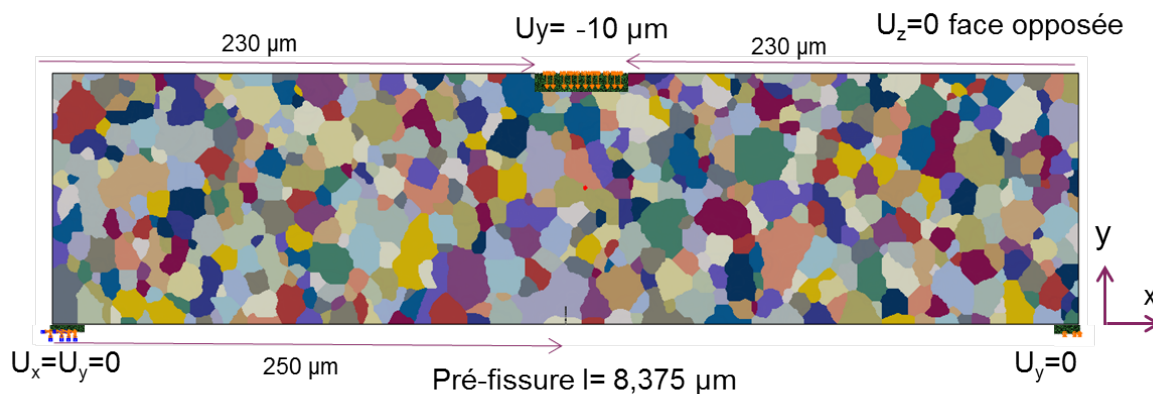


FIGURE 6 – Essai de flexion 3 points sur barreau avec une pré-fissure centrée. Déplacement imposé.

La fissuration simulée par méthode XFEM permet à la pré-fissure de s'étendre dans les éléments sans chemin prédéfini. La figure 7 montre les résultats de la propagation de la fissure dans 5 grains au delà de la pré-fissure. La fissure traverse les grains sans distinction. Des changements de direction sont visibles dans le premier grain après la pré-fissure et dans le second grain après franchissement du joint de grain. Dans le dernier grain (situé à mi-hauteur de l'éprouvette), la fissure n'avance plus en arrivant au joint de grain et bifurque dans une autre direction, plus favorable au critère de la loi cohésive sur la contrainte principale maximale.

### 3.2.2 Comportement élasto-plastique d'une microstructure d'acier nitruré

Une cartographie EBSD, issue de la thèse de Godet [13], a été utilisée pour étudier le comportement en micro-plasticité d'un acier de 32CrMoV12-9 nitruré. Celle-ci est représentée en figure 8. Cette microstructure est constituée de ferrite (98,8%<sub>vol</sub>), de cémentite (1,2%<sub>vol</sub>) et de quelques précipités de nitrures de fer  $\text{Fe}_4\text{N}$  (97 ppm<sub>vol</sub>).

La ferrite étant beaucoup plus ductile que la cémentite, on peut considérer que le comportement plastique de l'acier est principalement dû aux phénomènes de plasticité cristalline de la phase ferritique. C'est pourquoi le comportement de la cémentite a été supposé purement élastique tandis que celui de la ferrite a été supposé élastique plastique. Soit  $\epsilon$  le tenseur de déformation ; on a alors :

$$\epsilon = \epsilon^e + \epsilon^p \quad (3)$$

avec  $\epsilon^e$  et  $\epsilon^p$  respectivement les déformations élastique et plastique. Le comportement élastique est tel que décrit en équation (2) tandis que le comportement en plasticité cristalline est simulé selon le modèle

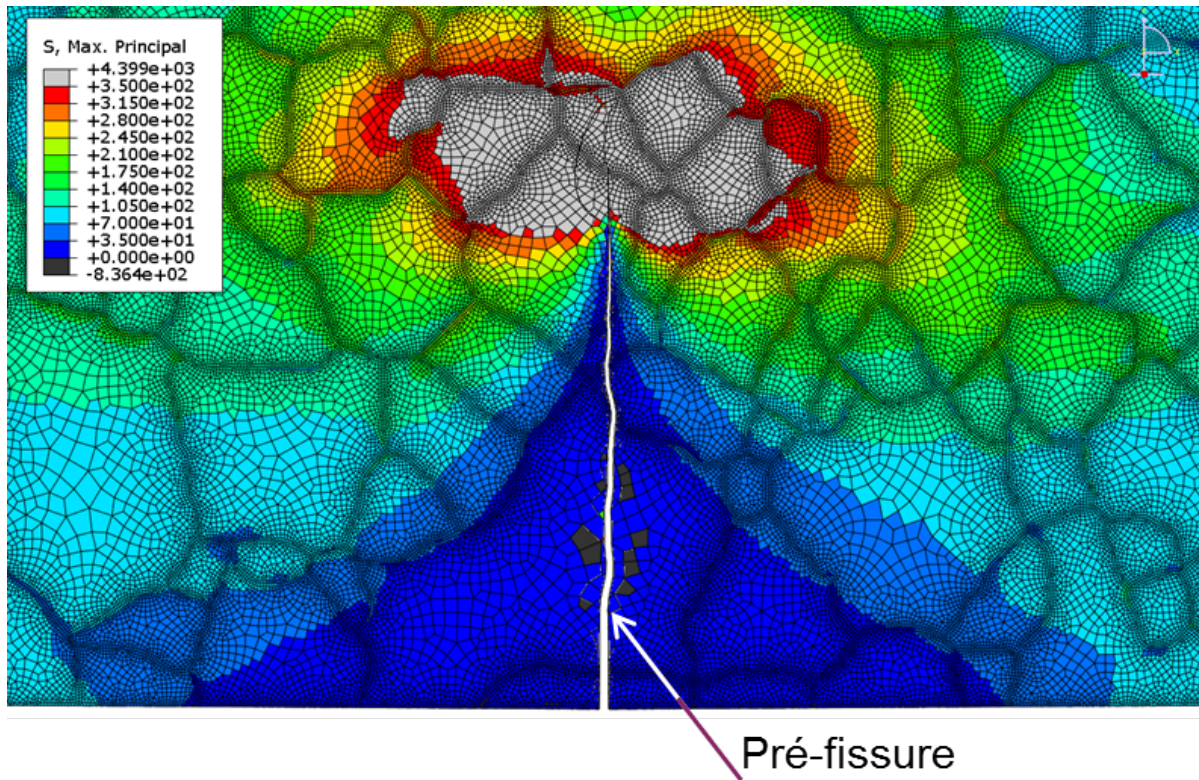


FIGURE 7 – Propagation de la fissure dans 5 grains. Contrainte principale maximale (MPa). Amplification  $\times 2$ .

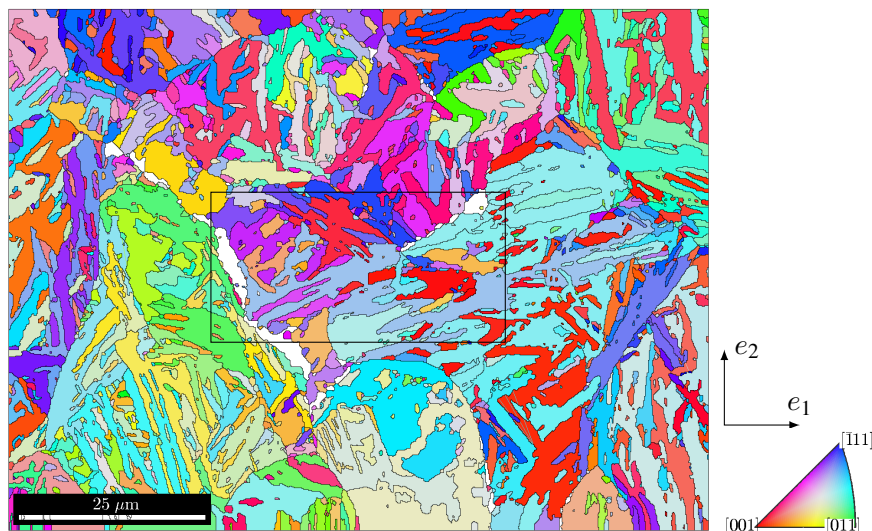


FIGURE 8 – Carte EBSD de l'acier 32CrMoV12-9 trempé après reconstruction. Seule la ferrite est représentée ici (le blanc correspond à la cémentite et au  $\text{Fe}_4\text{N}$ ). Le rectangle noir représente la zone de maillage présentée en figure 9.

de Huang [14]. Dans ce modèle, le comportement de chaque ensemble de systèmes de glissements est décrit par les paramètres suivants :

- la vitesse d'écoulement de référence ( $a$ ),
- le coefficient de sensibilité à la vitesse ( $n$ ),
- la contrainte de cisaillement initiale ( $\tau_0$ ),
- la contrainte de cisaillement pour un écrouissage infini ( $\tau_\infty$ ),
- le coefficient d'écrouissage propre à chaque système de glissement ( $h_0$ ),
- le coefficient d'écrouissage latent entre les différents systèmes de glissement ( $q_0$ ).

Le tableau 1 donne les paramètres élastiques des différentes phases de l'acier tandis que le tableau 2 donne les paramètres de plasticité cristalline de la ferrite.

Tableau 1 – Composantes du tenseur d'élasticité ( $C$ ) des différentes phases de l'acier nitruré (en GPa) selon la notation de Voigt.

	Cementite <sup>a</sup>	Ferrite <sup>b</sup>	Fe <sub>4</sub> N <sup>c</sup>
	Géométrie du cristal :		
	Orthorombique	CFC	CFC
$C_{11}$	388	276.6	313
$C_{22}$	345	276.6	313
$C_{33}$	322	276.6	313
$C_{44}$	15	97.58	46
$C_{55}$	134	97.58	46
$C_{66}$	134	97.58	46
$C_{12}$	156	145.8	137
$C_{13}$	164	145.8	137
$C_{23}$	162	145.8	137

<sup>a</sup> Jiang *et al.* [15]

<sup>b</sup> Souissi et Numakura [16]

<sup>c</sup> Takahashi *et al.* [17]

Tableau 2 – Paramètres de plasticité cristalline pour la ferrite.

Système de glissements	$\dot{\epsilon}$ (s <sup>-1</sup> )	$n$	$\tau_0$ (MPa)	$\tau_\infty$ (MPa)	$h_0$ (GPa)	$q_0$
{110}<111>	0.001 <sup>a</sup>	20 <sup>a</sup>	255 <sup>b</sup>	972 <sup>b</sup>	1855 <sup>b</sup>	1.0 <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Harewood et McHugh [18]

<sup>b</sup> Établi par essai-erreur

La figure 9 illustre le maillage obtenu depuis les données EBSD de l'acier 32CrMoV12-9. Le maillage est composé de 197 522 éléments coins (C3D6) avec un seul élément dans l'épaisseur. Un essai de traction quasistatique selon la direction  $e_1$  (voir Figure 8) a été simulé ici. Une déformation macroscopique longitudinale de 0,2% a été imposée.

La figure 10 illustre les résultats de simulation en plasticité cristalline de l'acier 32CrMoV12-9. Il apparaît sur la figure 10a que les contraintes sont localisées autour des grains de cémentite. La figure 10b montre que la déformation n'est pas homogène dans le matériau, cette localisation étant alors dépendante de l'orientation des lamelles de ferrite. De plus, il apparaît que le niveau de déformation macroscopique appliqué à cet agrégat (0,2%) est insuffisant pour faire apparaître les bandes de localisation.



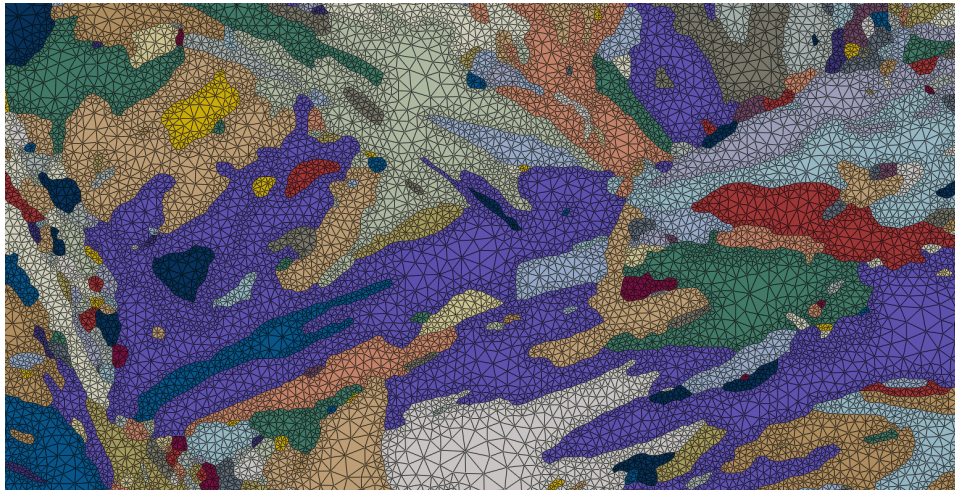


FIGURE 9 – Maillage obtenu depuis la carte EBSD de l’acier trempé. Seule la région représentée par un rectangle à la figure 8 est illustrée ici.

## 4 Conclusions et perspectives

L’algorithme MTEX2Gmsh a été utilisé dans ce travail pour générer des maillages dans le but d’étudier le comportement de différents agrégats polycristallins à l’échelle de leurs grains depuis des données EBSD. Les applications présentées sont :

- fissuration intragranulaire du dioxyde d’uranium ( $\text{UO}_2$ ) par la méthode XFEM avec un critère sur la contrainte principale maximale,
- déformation plastique en traction du 32CrMoV12-9 par un modèle de plasticité cristalline.

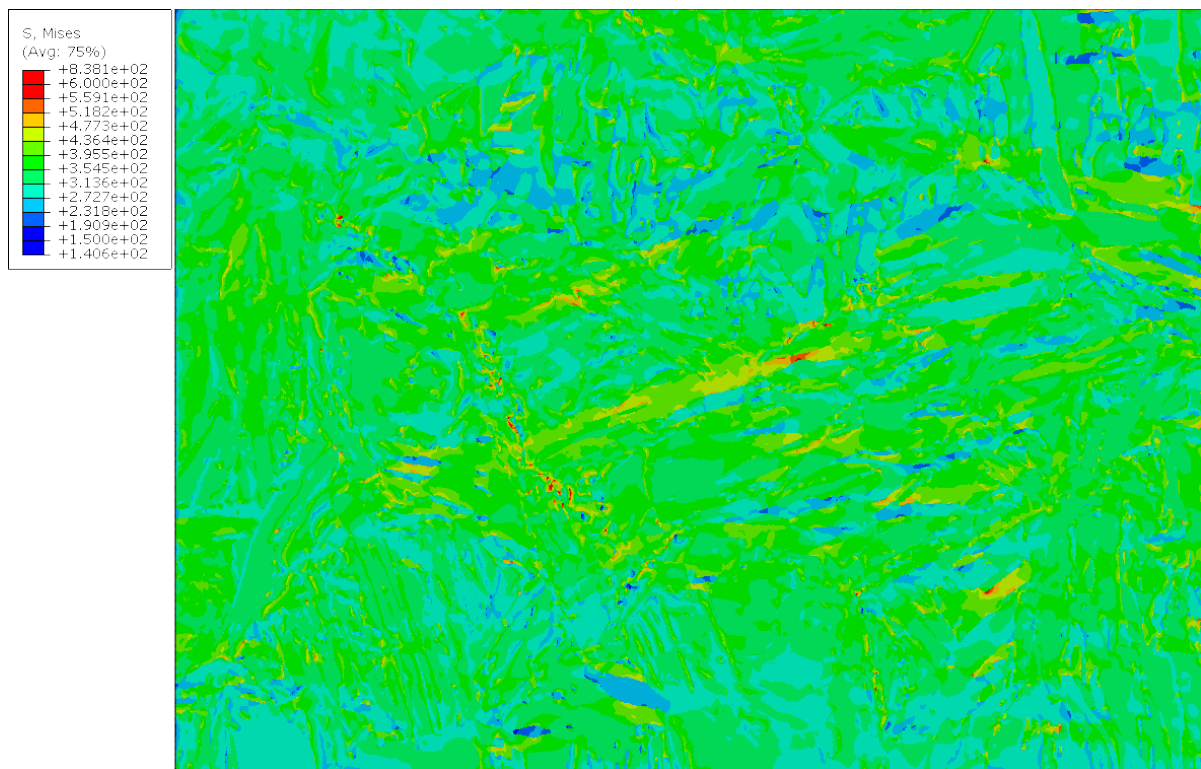
Ces applications montrent l’efficacité de l’algorithme proposé en terme de complexités de géométrie (tortuosité des joints de grain, imbrications multiples des grains etc.).

Des perspectives sont envisagées avec notamment l’expression du critère de fissuration dans la base du cristal en tenant compte de l’orientation des plans de clivage. Le but est d’analyser l’effet de la forme des joints de grains sur la propagation des fissures au travers de deux grains adjacents sur la trajet de la fissure.

## Références

- [1] H.J. BUNGE : *Texture analysis in materials science : mathematical methods*. Butterworth & Co, 1982.
- [2] F. BACHMANN, R. HIELSCHER et H. SCHAELEN : Texture analysis with mtex-free and open source software toolbox. *In Solid State Phenomena*, volume 160, pages 63–68. Trans Tech Publ, 2010.
- [3] R. QUEY, P.R. DAWSON et F. BARBE : Large-scale 3d random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(17):1729 – 1745, 2011. ISSN 0045-7825.
- [4] M. A. GROEBER et M. A. JACKSON : DREAM.3D : A digital representation environment for the analysis of microstructure in 3D. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 3(1):5, Apr 2014. ISSN 2193-9772.

(a)



(b)

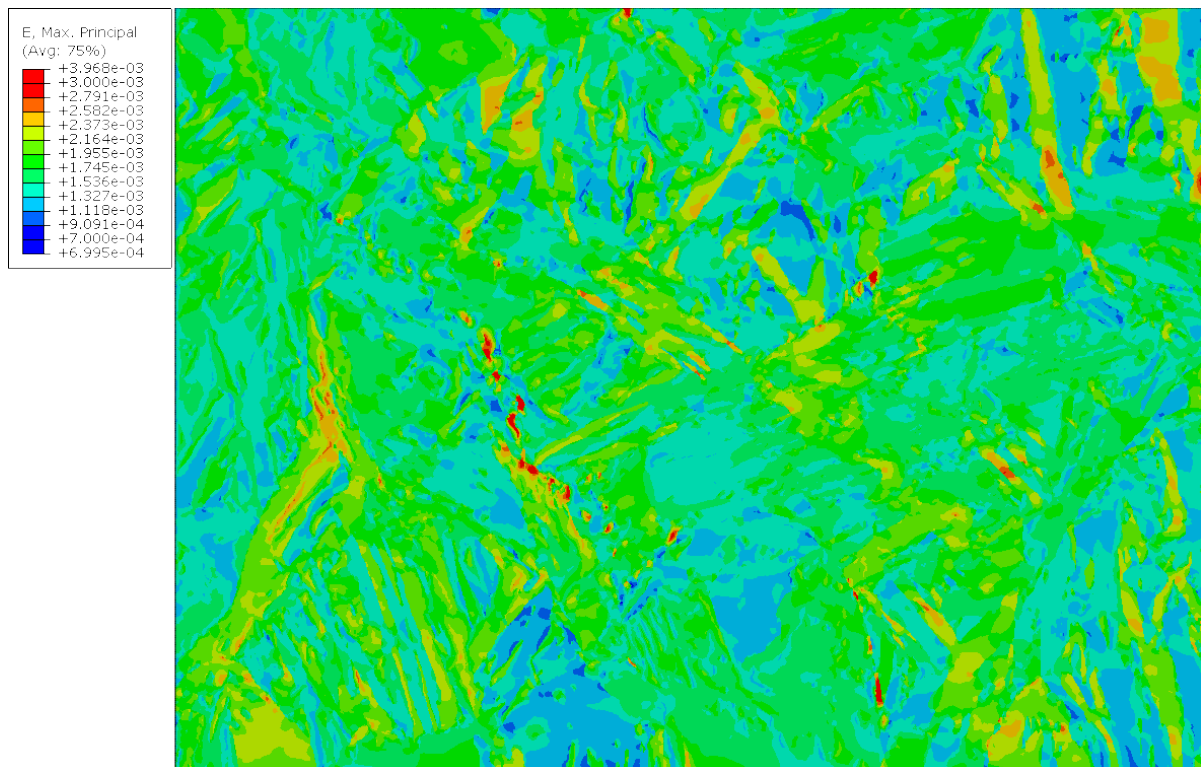


FIGURE 10 – Résultats de simulation en plasticité cristalline de l'acier 32CrMoV12-9 : (a) contraintes équivalent de von Mises et (b) déformation principale.

- [5] A. GUERY, F. HILD, F. LATOURTE et S. ROUX : Slip activities in polycrystals determined by coupling dic measurements with crystal plasticity calculations. *International Journal of Plasticity*, 81:249 – 266, 2016. ISSN 0749-6419.
- [6] F. BACHMANN, R. HIELSCHER et H. SCHAEBEN : Grain detection from 2d and 3d EBSD data—specification of the mtex algorithm. *Ultramicroscopy*, 111(12):1720 – 1733, 2011. ISSN 0304-3991.
- [7] C. DE BOOR : *A practical guide to splines*. Springer-Verlag, New York, 1978.
- [8] D. DEPRIESTER : MTEX2Gmsh, mars 2019. URL <https://github.com/DorianDepriester/mtex2Gmsh>. doi : 10.5281/zenodo.2595052.
- [9] C. GEUZAINÉ et J.-F. REMACLE : Gmsh : A 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International journal for numerical methods in engineering*, 79 (11):1309–1331, 2009.
- [10] J. SOULACROIX : *Approche micromécanique du comportement du combustible dioxyde d’uranium*, 2014.
- [11] J.B. WACHTMAN JR., M.L. WHEAT, H.J. ANDERSON et J.L. BATES : Elastic constants of single crystal UO<sub>2</sub> at 25C. *Journal of Nuclear Materials*, 16(1):39–41, 1965.
- [12] N. MOËS, J. DOLBOW et T. BELYTSCHKO : A finite element method for crack growth without remeshing. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 46:131–150, 1999.
- [13] F. GODET : *Influence de la microstructure sur le comportement mécanique d’une couche nitrurée de l’acier de nuance 33CrMoV12-9 en vue de l’optimisation des propriétés en fatigue*, 2018.
- [14] Y. HUANG : *A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the ABAQUS finite element program*. Harvard Univ., 1991.
- [15] C. JIANG, S.G. SRINIVASAN, A. CARO et S.A. MALOY : Structural, elastic, and electronic properties of Fe<sub>3</sub>C from first principles. *Journal of Applied Physics*, 103(4):043502, 2008.
- [16] M. SOUISSI et H. NUMAKURA : Elastic properties of Fe–C and Fe–N martensites. *ISIJ International*, 55(7):1512–1521, 2015.
- [17] T. TAKAHASHI, J. BURGHAUS, D. MUSIC, R. DRONSKOWSKI et J. M. SCHNEIDER : Elastic properties of  $\gamma'$ -Fe<sub>4</sub>N probed by nanoindentation and ab initio calculation. *Acta Materialia*, 60(5):2054 – 2060, 2012. ISSN 1359-6454.
- [18] F.J. HAREWOOD et P.E. MCHUGH : Comparison of the implicit and explicit finite element methods using crystal plasticity. *Computational Materials Science*, 39(2):481 – 494, 2007. ISSN 0927-0256.