

PROPOSITION DE POST-DOCTORAT

Intitulé : Modélisation microstructurale 3D à grande échelle : Formulation multi-champ de la méthode S-PFM et application à la croissance des polycristaux

Référence : **PDOC-DMAS-2021-01**
 (à rappeler dans toute correspondance)

Début du contrat : Janvier 2022

Date limite de candidature : Décembre 2021

Durée : 12 mois, éventuellement renouvelable une fois - Salaire net : environ 25 k€ annuel

Mots clés

Méthodes de champs de phase, microstructures, alliages métalliques

Profil et compétences recherchées

Science des matériaux, physique statistique, modélisation numérique, programmation avancée

Présentation du projet post-doctoral, contexte et objectif

Un des objectifs prioritaires aujourd'hui dans le domaine des matériaux est le développement de nouvelles approches numériques afin de réduire drastiquement le temps et le coût de développement de nouveaux matériaux.

L'un des aspects essentiels de cet objectif est d'être capable de modéliser fidèlement l'évolution des matériaux à l'échelle de leur microstructure. C'est à cette échelle mésoscopique, qui se situe entre 1 et 100 microns, que s'est imposée la méthode des champs de phase. Le LEM a joué un rôle important dans le développement de cette méthode, en particulier dans son extension au couplage multiphysique entre thermodynamique hors d'équilibre, déformation élastique et relaxation plastique [1]. Cependant, les modélisations à 3D et à grande échelle restent un défi pour la communauté en raison des ressources informatiques requises.

En 2018, nous avons proposé une nouvelle formulation des méthodes de champ de phase qui permet de multiplier par un ordre de grandeur les dimensions linéaires accessibles [2]. Cette formulation, intrinsèquement discrète, permet de réduire la résolution numérique des interfaces à essentiellement 1 point de grille sans toutefois induire de frottement sur la grille et tout en préservant un comportement isotrope. Les possibilités de la méthode ont été démontrées [2] et une première application à la modélisation des superalliages monocristallins a été réalisée (Cf. Figure 1) [3].

Toutefois, dans la grande majorité des situations d'intérêt, la description d'un alliage nécessite l'utilisation de plusieurs champs de phase afin de rendre compte de la multiplicité des domaines et phases qui constituent la microstructure. Il est donc essentiel d'étendre la première formulation S-PFM à une formulation où plusieurs champs de phase évoluent simultanément. Nous avons récemment franchi une 1^{ère} étape dans cette voie en formulant une version multi-champs bi-dimensionnelle pour la croissance normale de matériaux polycristallins [4]. Le résultat le plus significatif de ce travail a été de montrer que nous savons décrire non seulement des interfaces, mais aussi des jonctions triples, avec toujours essentiellement un seul point de grille dans l'épaisseur de ces objets.

Le but de ce post-doctorat est d'implémenter une version 3D de la formulation précédente, puis de la généraliser afin d'y intégrer la variation de l'énergie des joints de grains avec l'orientation cristallographique des grains adjacents. Un outil numérique 3D sera également développé et des applications sur des alliages polycristallins seront réalisées.

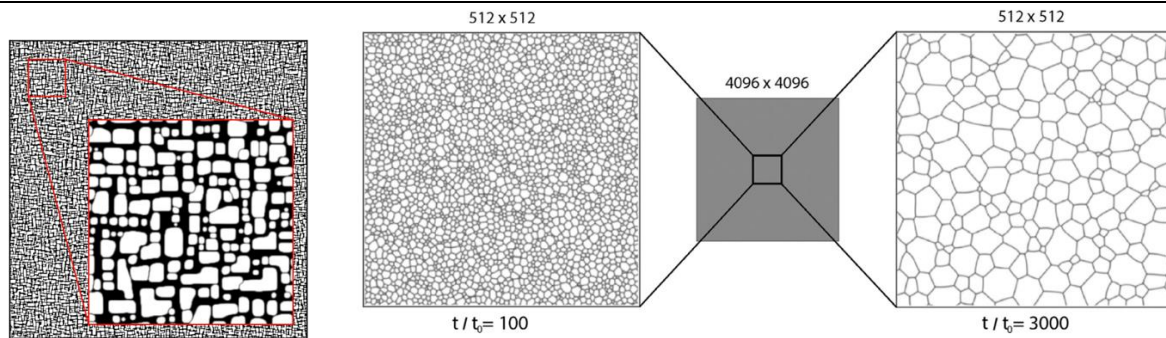


Figure 1: Gauche : Simulation S-PFM de la formation de microstructures cuboïdales dans les superalliages base nickel [2]. Le zoom présenté en encart correspond à la taille accessible par une modélisation champ de phase classique. Droite : Simulation de croissance normale de grain à 2D par la méthode S-PFM. Les microstructures présentées correspondent à une petite partie de la boîte de simulation

[1] M. Cottura, Y. Le Bouar, A. Finel, B. Appolaire, K. Ammar, S. Forest, A phase field model incorporating strain gradient viscoplasticity: Application to rafting in Ni-base superalloys, *J. Mech. Phys. Solids* 60 (2012) 1243.

[2] A. Finel, Y. Le Bouar, B. Dabas, B. Appolaire, Y. Yamada, T. Mohri, A Sharp-Interface Phase Field Method, *Phys. Rev. Lett.* 121 (2018) 025501.

[3] M. Degeiter, thèse de l'Université de Lorraine (2019), réalisée au DMAS.

[4] A. Dimokrati, Y. Le Bouar, M. Benyoucef, A. Finel, S-PFM model for ideal grain growth, *Acta Materialia* 201 (2020) 147–157

Collaborations extérieures

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : DMAS

Lieu (centre ONERA) : Châtillon

Contact : Yann Le Bouar et Alphonse Finel

Tél. : 01.46.73.45.92

Email : yann.lebouar@onera.fr, alphonse.finel@onera.fr