

DIGIMU®V3.0 : PREMIÈRE SOLUTION COMMERCIALE POUR LA MODÉLISATION PHYSIQUE DES ÉVOLUTIONS D'UN POLYCRISTAL DURANT LES PROCÉDÉS THERMOMÉCANIQUES DE MISE EN FORME DES MATÉRIAUX MÉTALLIQUES

Pascal De Micheli ^a, Ludovic Maire^b, Nathalie Bozzolo^b, Marc Bernacki^b

^a Transvalor SA, France,

^bMINES ParisTech, PSL Research University, CEMEF-Centre de mise en forme des matériaux, CNRS UMR 7635, CS 10207 rue Claude Daunesse, 06904 Sophia Antipolis Cedex, France
pascal.demicheli@transvalor.com

Mots-clefs: modélisation mésoscopique, polycristal, éléments finis, level set, croissance de grains, écrouissage, restauration, recristallisation statique et dynamique.

1 Introduction

L'état microstructural d'un matériau métallique joue un rôle prépondérant sur ses propriétés d'usage et son comportement mécanique durant la mise en forme. Il devient aujourd'hui nécessaire de maîtriser ces évolutions tout au long des procédés industriels afin de remplir des cahiers des charges exigeants et de répondre efficacement aux nouveaux marchés.

Les logiciels de simulation de mise en forme des matériaux dont disposent les industriels permettent d'utiliser des modèles métallurgiques principalement basés sur des équations phénoménologiques ou des modèles à champ moyen. Cependant, le domaine de validité de ces modèles associés à un jeu de paramètres est souvent limité à un matériau et un procédé. Réidentifier en permanence ces paramètres par des études expérimentales est synonyme de coûts prohibitifs.

Ces vingt dernières années, des solutions de modélisation académiques en champ complet sont apparues. Ces méthodes sous-entendent une modélisation directe des évolutions d'un polycristal sur un volume élémentaire représentatif à l'échelle mésoscopique. La modélisation des mécanismes physiques à l'œuvre rendant ces simulations plus génériques. On trouvera un état de l'art des principales méthodes existantes dans [1].

Depuis 2016, Transvalor propose le premier logiciel commercial de modélisation d'évolutions de microstructures en champ complet. Issu des travaux académiques du CEMEF [2–10], DIGIMU®V3.0 sorti en 2018 permet de modéliser de manière générique en 2D, en couplant approche phénoménologique pour la déformation et modélisation eulérienne des interfaces, la migration de joints de grains avec ou sans particules de seconde phases, la déformation du polycristal, l'écrouissage et la restauration, la recristallisation statique et dynamique, ainsi que les couplages entre ces phénomènes physiques. Une illustration des modèles présents dans DIGIMU®V3.0, avec application au 304L est décrite dans [10].

2 Définition du polycristal

DIGIMU®est un logiciel de modélisation 2D par éléments finis (EF) associé à un suivi des joints de grains du polycristal par la méthode level set [11]. Pour des raisons de performance, chaque grain n'est pas défini par sa propre fonction level set ψ , mais on regroupe le plus possible de grains non adjacents dans une même fonction grâce à un algorithme de coloration/recoloration [7], qui permet de réduire de manière drastique le nombre de level set à suivre (voir Fig. 1 a)).

DIGIMU®permet de générer de manière aléatoire un polycristal initial grâce à un algorithme de Laguerre-Voronoi couplé à des méthodes de packing de sphères performantes [5], respectant tout type de distribution de taille de grains initiale. Les grains peuvent-être équiaxes ou allongés (Fig. 2). Il est aussi possible de générer le polycristal en important directement des données expérimentales, afin de reproduire numériquement une microstructure spécifique.

Un algorithme d'adaptation de maillage automatique anisotrope est utilisé afin d'obtenir une définition optimale de l'interface avec des temps de calculs tout à fait acceptables pour une utilisation industrielle.

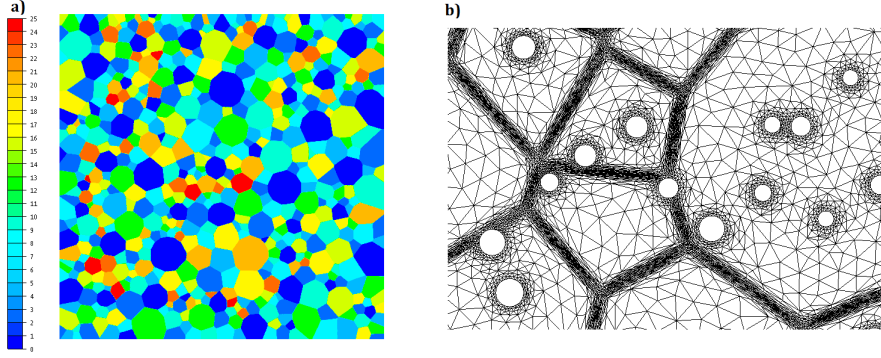


Figure 1: a) Polycrystal de 549 grains généré par un algorithme de type Laguerre-Voronoi et décrit à l'aide de 25 fonctions level set grâce à un algorithme de coloration de graphe [7]. Le code couleur correspond à l'identité des fonctions level set. b) Adaptation de maillage automatique et anisotrope autour des joints de grains et des particules de seconde phase.

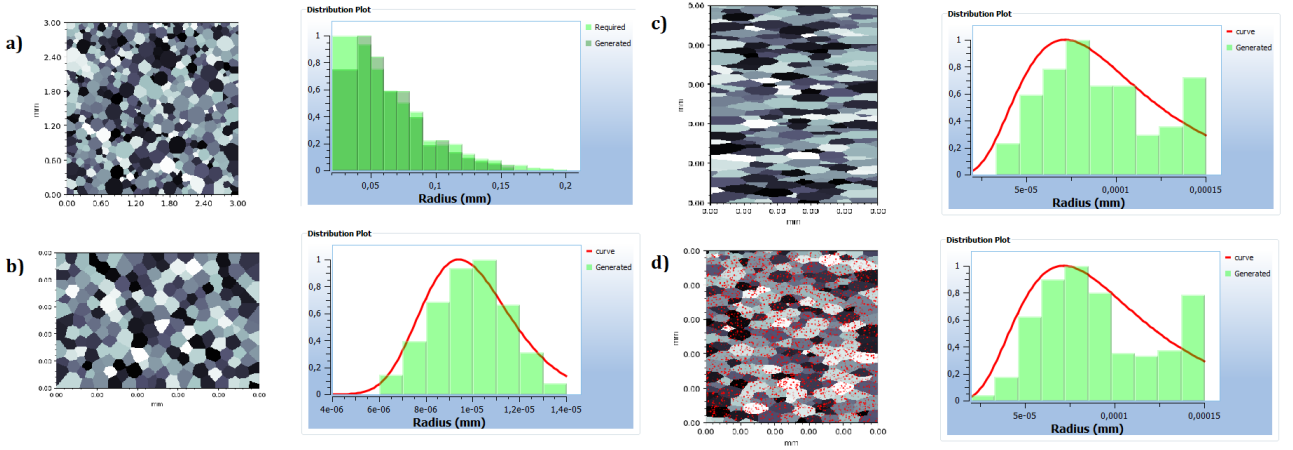


Figure 2: Génération de microstructures initiales depuis des données statistiques: a) grains équiaxes suivant un histogramme, b) grains équiaxes suivant une distribution lognormale, c) grains allongés (ratio 4) sur une distribution lognormale, d) grains allongés (ratio 2) sur une distribution lognormale avec une distribution bimodales de PSP ($r_1 = 1\mu m$ et $r_2 = 5\mu m$) - fraction surfacique totale de 2% (représentées en rouge).

Cet algorithme assure de manière transparente la convergence et la précision du modèle sans que l'utilisateur n'ait à se soucier des paramètres numériques (voir Fig.1 b)) [2, 3, 5].

DIGIMU[®]V3.0 permet aussi de définir une densité de dislocation initiale par grain. La distribution requise est décrite soit par des données statistiques ou bien en important et extrapolant un champ de densité de dislocations de type GND directement à partir de résultats expérimentaux obtenus par EBSD [12].

3 Migration des joints de grains

Deux mécanismes sont moteurs lors de la migration d'un joint de grain : la pression liée à la capillarité, i.e. la tendance à réduire l'énergie d'interface, et le gradient d'énergie stockée à l'interface qui va favoriser la croissance des grains moins écrouis. La vitesse du joint de grain peut être exprimée selon les deux termes $\vec{v}_c$ et $\vec{v}_e$ sous la forme:

$$\vec{v} = \vec{v}_c + \vec{v}_e \text{ avec } \vec{v}_e = M_b \delta(\varepsilon) E \vec{\nabla} \psi \text{ et } \vec{v}_c = -M_b \gamma_b \Delta \psi \vec{\nabla} \psi, \quad (1)$$

avec M_b la mobilité du joint de grain, $\delta(\dot{\epsilon})$ un paramètre dépendant de la vitesse de déformation, E le saut d'énergie stockée à l'interface et γ_b l'énergie de joint de grain. Le problème de migration des joints de grains se ramène alors à un problème de convection diffusion à résoudre sur les fonctions level set. A ce stade, les paramètres M_b et γ_b sont supposés isotropes. Des développements sont en cours pour améliorer ces hypothèses fortes [13].

DIGIMU®V3.0 représenter les particules de seconde phase (PSP) par des trous circulaires dans le maillage. Ils imposent leur courbure aux interfaces des joints de grains qui les traversent. Cette courbure seule engendre par capillarité les effets d'ancrage du joint de grains, sans avoir à considérer de pression d'ancrage au modèle présenté ci-dessus.

La figure 3 présente des résultats obtenus dans le cadre d'un stage sur l'étude du traitement thermique d'aciers ODS chargés de particules nanométriques. On distingue bien sur les images l'effet d'ancrage des particules sur les joints de grains. Le logiciel DIGIMU prouve sa pertinence en arrivant à prédire de manière très précise la taille de grain à l'équilibre [14].

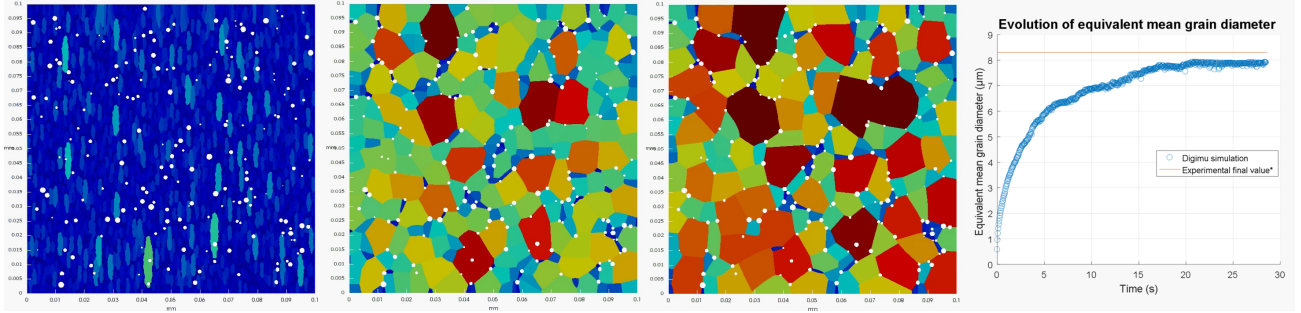


Figure 3: Etat initial, intermédiaire et final d'un polycristal texturé d'acier ferritique ODS pendant un traitement thermique, et comparaison des résultats DIGIMU® avec des observations expérimentales. Chaque grain est coloré suivant sa taille [14].

4 Ecroissance et Restauration

DIGIMU®V3.0 permet de suivre les évolutions de densité de dislocations et d'énergie stockée, considérées constantes par grains. Là aussi, des développements sont en cours sur cette limitation [15].

Lors de la migration d'un joint de grain, l'énergie stockée est mise à jour étant donné que la zone balayée par le joint de grain est non écrouie. On recalcule donc une nouvelle densité de dislocations dans le grain en croissance, moyenne surfacique entre la zone qui appartenait déjà au grain, et celle gagnée disposant d'une densité de dislocation ρ_0 dépendante du matériau considéré.

Le formalisme utilisé dans DIGIMU peut être couplé à un code de plasticité cristalline [4]. Pour des raisons de temps de calcul, la version commerciale de DIGIMU® dispose à ce jour d'une approche champ moyen pour prédire l'évolution de la densité de dislocations. Le modèle de Yoshie-Laasraoui-Jonas, éprouvé et efficace a été adopté [16]. Ce modèle relie l'évolution de la densité de dislocations moyenne dans un grain j , ρ_j , à la déformation du polycristal, en fonction du paramètre d'écrouissage K_1 et du paramètre de restauration K_2 , tous deux dépendants de la température et de la vitesse de déformation:

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial \epsilon_{\text{eff}}^p} = K_1 - K_2 \rho_j. \quad (2)$$

La restauration statique est prise en compte en fonction de l'écrouissage atteint dans le grain et du paramètre K_s dépendant de la température :

$$\dot{\rho}_j = -K_s \rho_j. \quad (3)$$

5 Recristallisation statique ou dynamique

DIGIMU®V3.0 permet de simuler la germination de nouveaux grains, dans les zones suffisamment écrouies. Dans notre modèle, l'énergie d'interface étant supposée constante, ce phénomène ne dépendra que de la densité de dislocation. Celle-ci étant supposée constante par grain, le critère de densité de dislocations critique ρ_{cr} ne permet pas de localiser l'endroit précis où le germe va apparaître dans le grain. Cependant, lors de la déformation, les dislocations ayant tendance à se concentrer prioritairement aux joints de grains, nous avons fait l'hypothèse que les germes apparaissent sur un noeud du maillage proche de l'interface des grains ayant dépassé le critère de densité de dislocations [17].

Le calcul de ρ_{cr} se fait de manière itérative avec la formule suivante [18], en fonction de la mobilité du joint de grain M_b et de l'énergie du joint de grain γ_b :

$$\rho_{cr} = \left[\frac{-2\gamma_b \dot{\epsilon} \frac{K_2}{M_b \delta(\dot{\epsilon}) \tau^2}}{\ln \left(1 - \frac{K_2}{K_1} \rho_{cr} \right)} \right]^{1/2}. \quad (4)$$

Le germe qui apparaît est non écroui, c'est à dire avec une densité de dislocation égale à ρ_0 . Sa taille est fixée par le critère de Bailey-Hirsch [19], qui calcule le rayon critique moyen, représentant l'équilibre entre les pressions motrices. Ce rayon est pondéré par un coefficient de sécurité ω de 1.5 pour être sûr que les germes ne disparaissent pas (erreurs possibles de discrétisation spatiale dans la prise en compte de la pression capillaire des grains de faible taille).

$$r^* = \omega \frac{2\gamma_b}{\rho_{cr} \tau}. \quad (5)$$

La fréquence d'apparition $\dot{V}$ est fixée par le coefficient de probabilité de germination $K_g(T, \dot{\epsilon})$ et la surface Φ des joints de grains ayant atteint l'énergie critique de germination (avec une hypothèse sous-jacente de germination en collier).

$$\dot{V} = K_g \Phi \Delta t. \quad (6)$$

Une fois le germe apparu, sa croissance/décroissance par rapport à ses voisins sera naturellement prédite par le modèle de migration des joints de grains présenté auparavant. L'ensemble de ces développements sont finement détaillés et discutés dans Maire et al. [10].

On observe dans la Fig. 4 les évolutions d'un polycristal d'acier austénitique 304L déformé 10s à 0.09 s⁻¹ à 1100°C puis maintenu en refroidissement contrôlé de 1100°C à 1000°C pendant 90 secondes. On note sur les graphes l'augmentation de la densité de dislocations moyenne dans un premier temps, qui ralentit puis diminue au bout de 6 secondes lorsque la germination commence. Simultanément, la taille de grain moyenne (en nombre) chute. La germination en collier se poursuit, jusqu'à ce que la croissance des germes prenne le dessus à 10 secondes. La dislocation moyenne continue donc de baisser, avec l'augmentation de la fraction recristallisée due à la migration des joints de grains recristallisés, entraînant une lente remontée de la taille de grains moyenne.

6 Conclusion et perspectives

La version commerciale DIGIMU®V3.0 atteint un seuil important dans le domaine de la démocratisation de la modélisation des évolutions d'un polycristal en champ complet. Elle permet de générer rapidement des microstructures initiales variées et des maillages éléments finis non structurés ad hoc. Elle couvre un large spectre d'évolutions microstructurales en régime monophasé, telle que la migration de joints de grains avec ou sans particules de seconde phases, la déformation du polycristal, l'écrouissage et la restauration, ainsi que la recristallisation statique ou dynamique. Le couplage entre les différents phénomènes physiques est naturel, et la discrétisation temporelle et spatiale est automatiquement adaptée à la simulation pour obtenir le meilleur compromis entre précision et temps de calcul. Cette version est livrée avec une première base de données matériaux, mais aussi avec une notice explicative permettant d'identifier les paramètres adaptés à ses propres matériaux. Les réglages numériques

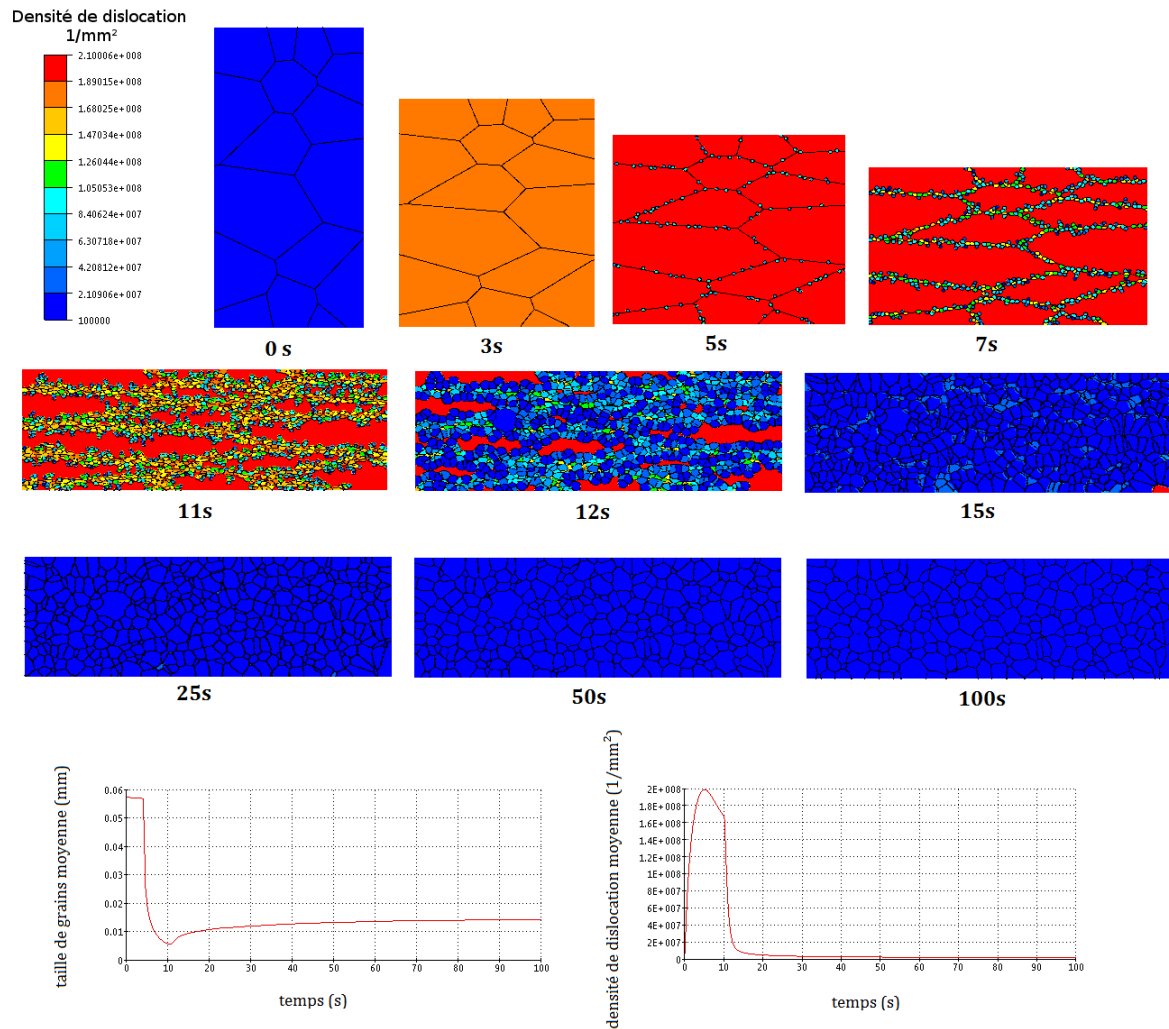


Figure 4: Recrystallisation d'un acier 304L déformé 10 secondes puis sous refroidissement contrôlé pendant 90 secondes.

intrinsèques à la formulation éléments finis sont rendus transparents grâce à l'adaptation automatique des paramètres de maillage/remailage et du pas de temps, permettant de se concentrer sur la physique.

L'utilisateur averti peut observer directement des phénomènes locaux dans ses pièces, identifier les paramètres de ses modèles à champ moyen pour un matériau ou un procédé donné en mixant les études expérimentales et tests numériques, donc plus rapidement et de manière moins onéreuse. Il peut aussi, à l'aide de la simulation en champ complet, mieux définir les limites de ses modèles à champ moyen, et éventuellement tenter d'en élargir le domaine de validité. Le novice, universitaire ou industriel, a lui l'opportunité d'observer visuellement dans un contexte interactif et didactique les effets des différents phénomènes physiques et de leur couplages sur l'évolution de la microstructure. L'expérience acquise par la simulation complète celle acquise par le travail expérimental.

Le dynamisme des actions de recherche réalisées au CEMEF au sein des chaires industrielles DIGIMU et OPALE permettra d'alimenter richement le logiciel pour les années à venir. DIGIMU®V4.0 en 2019 intégrera les calculs 3D et DIGIMU®V5.0 en 2020 la prise en compte de l'anisotropie de joints de grains et des macles, ainsi que le changement de phase. Des travaux en cours sur la plasticité cristalline et la recrystallisation continue pourraient aussi être intégrés dans les prochaines années. Des études complémentaires sur la gestion du maillage et des autres paramètres numériques du modèle assureront de leur côté le maintien d'un ratio précision/coût de calcul optimal. DIGIMU®, premier logiciel commercial de simulation des évolutions d'un polycristal à champ complet, est et restera au

contact des dernières avancées académiques, afin de fournir au plus tôt des solutions concrètes aux acteurs de l'industrie métallurgique.

References

- [1] H. Hallberg. Approaches to Modeling of Recrystallization. *Metals* 1(1):16–48, 2011
- [2] M. Bernacki, Y. Chastel, T. Coupez, R. Logé. Level set framework for the numerical modelling of primary recrystallization in polycrystalline materials. *Scripta Materialia*, 58(12):1129–1132, 2008
- [3] M. Bernacki, R. Logé, T. Coupez. Level set framework for the finite-element modelling of recrystallization and grain growth in polycrystalline materials. *Scripta Materialia*, 64(6):525–528, 2011
- [4] R. Loge, M. Bernacki, H. Resk, L. Delannay, H. Dignonnet, Y. Chastel, and T. Coupez. Linking plastic deformation to recrystallization in metals using digital microstructures. *Philosophical Magazine*, 88(30-32):3691–3712, 2008.
- [5] K. Hitti, P. Laure, T. Coupez, L. Silva, M. Bernacki. Precise generation of complex statistical Representative Volume Elements (RVEs) in a finite element context. *Computational Materials Science*, 61:224–238, 2012
- [6] M. Shakoor, B. Scholtes, P.-O. Bouchard, M. Bernacki. An efficient and parallel level set reinitialization method – Application to micromechanics and microstructural evolutions. *Applied Mathematical Modelling*, 39(23-24):7291–7302, 2015
- [7] B. Scholtes, M. Shakoor, A. Settefrati, P.-O. Bouchard, N. Bozzolo, M. Bernacki. New finite element developments for the full field modeling of microstructural evolutions using the level-set method. *Computational Materials Science*, 109:388–398, 2015
- [8] B. Scholtes, R. Boulais-Sinou, A. Settefrati, D. Pino Muñoz, I. Poitroult, A. Montouchet, N. Bozzolo, M. Bernacki. 3D level set modeling of static recrystallization considering stored energy fields. *Computational Materials Science*, 122:57–71, 2016
- [9] L. Maire, B. Scholtes, C. Moussa, N. Bozzolo, D. Pino Muñoz, M. Bernacki. Improvement of 3D mean field models for capillarity-driven grain growth based on full field simulations. *Journal of Materials Science*, 51(24):10970–10981, 2016
- [10] L. Maire, B. Scholtes, C. Moussa, N. Bozzolo, D. Pino Muñoz, A. Settefrati, M. Bernacki. Modeling of dynamic and post-dynamic recrystallization by coupling a full field approach to phenomenological laws. *Materials & Design*, 133:498–519, 2017
- [11] S. Osher, J.A. Sethian, Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, 79(1):12–49, 1988
- [12] A. Agnoli, M. Bernacki, R. Logé, J.-M. Franchet, J. Laigo, N. Bozzolo. Selective growth of low stored energy grains during δ sub-solvus annealing in the inconel 718 nickel base superalloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 46(9):4405–4421, 2015.
- [13] J. Fausty, Y. Jin, M. Bernacki, N. Bozzolo. Modeling anisotropic grain growth in nickel superalloys. In *EUROMAT 2017*, Thessaloniki, GREECE, September 17 – 22 2017.
- [14] F. Villaret. 2D grain growth modeling in ODS steel with different full field approaches. rapport de stage 3e année ENSIACET, 2017
- [15] D. Ilin, B. Scholtes, N. Bozzolo, D. Pino Muñoz, M. Bernacki. Effect of intragranular strain heterogeneity on recrystallization kinetics assessed by numerical simulation at the mesoscopic scale. Colloque "Métallurgie, quel avenir!" Saint-Etienne, France, 27 Juin - 01 Juillet 2016.
- [16] A. Yoshie, H. Morikawa, Y. Onoe, K. Itoh. Formulation of static recrystallization of austenite in hot rolling process of steel plate. *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, 27(6):425–431, 1987
- [17] F. J. Humphreys, M. Hatherly. *Recrystallization and related annealing phenomena*, Elsevier, 2004.
- [18] O. Beltran, K. Huang, R. Logé. A mean field model of dynamic and post-dynamic recrystallization predicting kinetics, grain size and flow stress. *Computational Materials Science*, 102:293–303, 2015
- [19] J. E. Bailey, P. B. Hirsch. The Recrystallization Process in Some Polycrystalline Metals. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 267(1328):11–30, 1962