HAL
open science

Modélisation 2D en champ complet de la croissance de grains dans les aciers ODS : level-set versus Monte-Carlo

Flore Villaret, Benjamin Hary, Yann de Carlan, Roland E. Logé, Thierry Baudin, Nathalie Bozzolo, Marc Bernacki

To cite this version:

Flore Villaret, Benjamin Hary, Yann de Carlan, Roland E. Logé, Thierry Baudin, et al.. Modélisation 2D en champ complet de la croissance de grains dans les aciers ODS : level-set versus Monte-Carlo. Journées annuelles SF2M, SF2M (Société Française de Métallurgie et des Matériaux), Oct 2017, Lyon, France. hal-01624645

HAL Id: hal-01624645

https://minesparis-psl.hal.science/hal-01624645

Submitted on 26 Oct 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Modélisation 2D en champ complet de la croissance de grains dans les aciers ODS : level-set versus Monte-Carlo

F. Villaret[a], B. Hary[b], Y. de Carlan[b], R. Logé[c], T. Baudin[d], N. Bozzolo[a], M. Bernacki[a]

[a] MINES ParisTech, PSL - Research University, CEMEF - Centre de mise en forme des matériaux, France,
[b] CEA Saclay, France,
[c] Thermomechanical Metallurgy Laboratory, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Switzerland,
[d] ICMMO, Univ. Paris-Sud, France

Résumé

La croissance de grains dans un acier ODS au cours d'un traitement thermique a été modélisée en 2D par la méthode level-set (logiciel DIGIMU®). Diverses tailles et fractions surfaciques de populations d'oxydes ont été considérées afin de comparer les résultats obtenus aux résultats expérimentaux. Une comparaison des résultats avec ceux obtenus par la méthode stochastique champ complet de type Monte-Carlo est proposée, permettant de mieux appréhender les hypothèses et paramètres utilisés dans ce modèle.

Introduction

Les aciers ODS (Oxide Dispersion Strenghening) sont des aciers à matrice ferritique durcis par la présence de nombreuses nanoparticules d'oxyde $Y_2Ti_2O_7$[1]. Ils sont majoritairement utilisés pour des applications dans l'industrie du nucléaire. Lors de leur mise en forme, ces matériaux vont subir des cycles de déformation / recuit permettant d'obtenir la pièce finale voulue. Chaque étape de recuit doit être parfaitement maitrisée afin d'obtenir une microstructure et des propriétés mécaniques optimales. En effet, au cours de cette étape, plusieurs phénomènes conduisant à une évolution de la microstructure se produisent : restauration, recristallisation et croissance de grains. Les nanoparticules d'oxyde vont freiner la recristallisation et la croissance de grains par épinglage des joints de grains (le formalisme d'épinglage de Smith-Zener étant considéré dans l'état de l'art). L'utilisation de la simulation numérique permet de valider certains mécanismes et d'optimiser les traitements thermiques en réduisant le nombre d'expériences. Pour la recristallisation des ODS, différents modèles peuvent être utilisés et comparés.

Méthodes de modélisation

Monte-Carlo

La méthode de simulation Monte-Carlo est une méthode dite probabiliste : l'évolution de la microstructure est modélisée par des lois de probabilités utilisant la minimisation de l'énergie du système, elle-même définie en prenant en compte au mieux les différents mécanismes énergétiques à l'œuvre. Le domaine de simulation est découpé en pixels en 2D ou voxels en 3D, une énergie est attribuée à chaque pixel (somme de l'énergie d'interface et de l'énergie interne due aux dislocations). A chaque étape de calcul, des pixels sont tirés au hasard dans le domaine de départ pour être potentiellement réorientés selon l'orientation de leurs voisins et adopter l'énergie globale de ceux-ci.

Si l'énergie du pixel/voxel tiré est ainsi minimisée, la probabilité que la réorientation se produise sera proportionnelle à la mobilité du joint de grains [2]. Si l'énergie n'est pas minimisée, la probabilité de réorientation est calculée avec un facteur d'agitation thermique permettant de mieux se rapprocher de la réalité (paramètre de calibration).

Les simulations Monte-Carlo sont conduites à partir de cartographies d'orientation obtenues expérimentalement par EBSD, ce qui permet de prendre en compte la texture cristallographique par la mesure des angles d'Euler dans la définition des propriétés des joints de grains.

Etant bien plus petites que la taille d'un pixel, les nanoparticules d'oxydes ne sont pas modélisées explicitement et sont introduites indirectement dans ce modèle par le biais d'une pression supplémentaire selon le formalisme de Smith-Zener, ou concrètement l'ajout d'un terme correspondant d'énergie par pixel [3].

Ce modèle présente donc l'avantage d'être peu coûteux numériquement puisqu'il ne nécessite que des calculs de probabilité sur grilles régulières. En revanche l'absence de relation directe avec le temps physique et l'introduction de paramètres purement numériques, rend obligatoire la calibration du modèle par des plans d'expériences riches.

Level-set

Au contraire de la méthode Monte-Carlo, la méthode level-set utilisée dans cette étude, est une méthode déterministe basée sur la résolution d'équations aux dérivées partielles (EDP) dans le cadre des éléments finis (EF) [4,5]. L'approche considérée ici est de type P1 (interpolation linéaire par élément) sur maillages non structurés avec éléments triangulaires. La fonction level-set en un point donné correspond initialement à une distance par rapport à une interface. Grâce à un algorithme de coloration/recoloration de graphe, le polycristal peut, quelque que soit le nombre de grains initial considéré, être décrit par un nombre restreint de fonctions level-set (typiquement moins de 10 en 2D) [5,6]. L'ensemble des isovaleurs 0 des fonctions level-set représente ainsi le réseau des joints de grains. A chaque pas de temps, des équations de convection-diffusion des fonctions level-set permettent de rendre compte des mouvements des joints de grains résultants des différentes forces motrices en 2D ou 3D [4-7]. Dans ce modèle, les particules sont représentées

explicitement par des trous dans le maillage [7]. L'interaction entre les joints de grains et les particules est ainsi directement prise en compte par la courbure des joints de grains et l'énergie d'interface au voisinage des particules [7]. Aucune pression supplémentaire approchée n'a à être définie dans cette formulation.
Dans ces premières simulations, les oxydes sont supposés incohérents avec la matrice et statiques. L'énergie d'interface et la mobilité des joints de grains sont considérées comme isotropes.
Basée sur la résolution d'EDP, cette méthode est donc précise et en lien direct avec le temps physique. Elle est en revanche *a priori* plus coûteuse en ressources numériques et a nécessité de nombreuses optimisations en termes de temps de calculs avant de pouvoir être utilisable dans un code industriel (DIGIMU®). Par ailleurs la prise en compte de l'anisotropie des propriétés des interfaces est en cours de développement.

Résultats obtenus

Croissance de grains sans particules

Dans un premier temps, des simulations ont été conduites en l'absence de nanoparticules et d'énergie stockée par les approches level-set et Monte-Carlo. Celles-ci ont permis d'établir une corrélation entre le temps physique et le Pas Monte-Carlo correspondant. La corrélation, présentée sur la Figure 1, est basée sur la comparaison des diamètres équivalents moyens obtenus pour diverses durées de simulation lors d'un maintien en température à 1150°C.

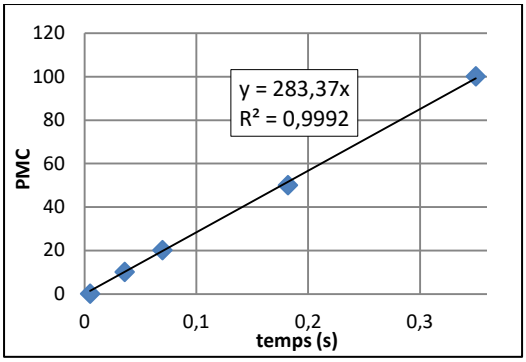

Figure 1: corrélation entre Pas Monte-Carlo et temps physique grâce aux simulations de type level-set.

Croissance de grains en présence de particules

Par la suite, des oxydes ont été introduits dans les microstructures simulées par l'approche level-set afin d'étudier l'influence de leur taille et de leur densité sur la taille de grains finale. Les populations de particules ainsi étudiées sont résumées dans le tableau 1. Ces populations sont définies par une distribution normale de leurs rayons.

Tableau I. Populations de particules étudiées

r_{moyen} (nm)	F_v (%)
10	1
10	0.5
5	1
5	0.5

La présence de particules a pour effet de rapidement figer la microstructure, comme on peut le voir sur les figures 2 et 3. La comparaison entre modèle de Monte-Carlo et prédictions level-set est en cours.

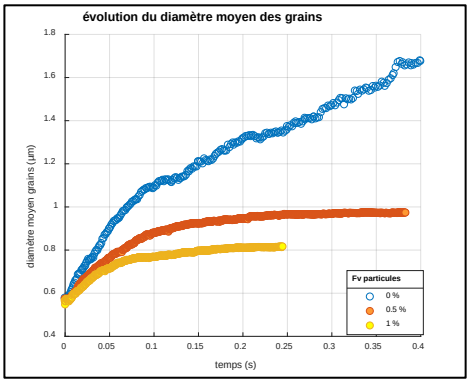

Figure 2 : évolution du diamètre moyen des grains au cours du temps en fonction de la fraction de particules ($r_{particules}$ = 10 nm), simulations level-set.

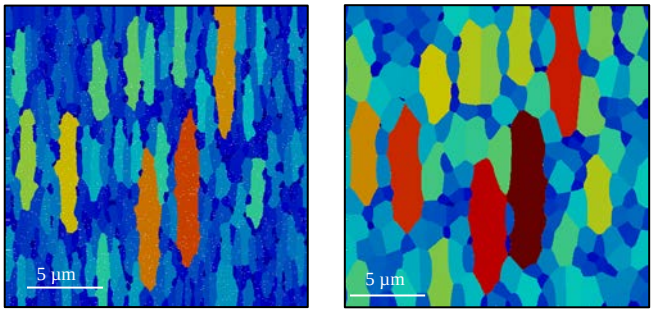

Figure 3 : microstructures obtenues après un traitement thermique simulé de 0,2 s à 1150°C par l'approche level-set. À gauche avec particules (points blancs, 10 nm, 1%), à droite sans particules.

Remerciements

Les auteurs remercient AREVA NP, ARCELORMITTAL, ASCOMETAL, AUBERT & DUVAL, le CEA, SAFRAN, TIMET et TRANSVALOR ainsi que l'ANR pour le soutien financier apporté à ces travaux à travers le consortium et la chaire ANR industrielle DIGIMU.

Références

[1] C. C. Eiselt, H. Schendzielorz, A. Seubert, B. Hary, Y. de Carlan, P. Diano, B. Perrin, D. Cedat, Nucl. Mater. Energy, 9, 22-28, 2016.
[2] M. A. Miodownik, J. Light Met., 2 (3), 125-135, 2002.
[3] A. R. Eivani, J. Zhou, et J. Duszczyk, Comput. Mater. Sci., 54, 370-377, 2012.
[4] M. Bernacki, Y. Chastel, T. Coupez, et R. E. Logé, Scr. Mater., 58 (12), 1129-1132, 2008.
[5] M. Bernacki, R. E. Logé, et T. Coupez, Scr. Mater., 64 (6), 525-528, 2011.
[6] B. Scholtes, M. Shakoor, A. Settefrati, P.-O. Bouchard, N. Bozzolo, et M. Bernacki, Comput. Mater. Sci., 109, 388-398, 2015.
[7] A. Agnoli, N. Bozzolo, R. Logé, J.-M. Franchet, J. Laigo, et M. Bernacki, Comput. Mater. Sci., 89, 233-241, 2014.