



HAL
open science

Simulation élément finis de la croissance de grains anisotrope dans les métaux

Julien Fausty, Nathalie Bozzolo, Yuan Jin, Marc Bernacki

► **To cite this version:**

Julien Fausty, Nathalie Bozzolo, Yuan Jin, Marc Bernacki. Simulation élément finis de la croissance de grains anisotrope dans les métaux. Journées annuelles SF2M, SF2M (Société Française de Métallurgie et des Matériaux), Oct 2017, Lyon, France. <hal-01625076>

HAL Id: hal-01625076

<https://minesparis-psl.hal.science/hal-01625076v1>

Submitted on 27 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.



HAL Authorization

Simulation élément finis de la croissance de grains anisotrope dans les métaux.

Julien Fausty ^a, Nathalie Bozzolo ^a, Yuan Jin ^{a,b} et Marc Bernacki ^a

^a MINES 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

^b Now at Safran China, Beijing - China

Résumé

Des développements nécessaires à la prise en compte de l'anisotropie interfaciale dans les simulations de croissance de grains et de recristallisation sont réalisés dans un contexte éléments finis et en employant la méthode Level-Set (contexte du développement du logiciel DIGIMU®). Les premiers résultats seront présentés et comparés à l'état de l'art.

Introduction

Le comportement des métaux en service aussi bien qu'en mise en forme dépend fortement de leur microstructure. Pour mieux contrôler cette microstructure, il faut développer des outils capables de prévoir son évolution au cours des opérations de mise en forme (déformation, traitement thermique, etc.).

La physique de ces transformations à l'échelle de la microstructure a souvent été appréhendée en faisant l'hypothèse d'un comportement isotrope des joints de grains alors qu'il est connu que les propriétés des joints de grains dépendent de leurs caractéristiques cristallographiques [1]. L'énergie ou la mobilité des joints de grains sont en effet généralement considérées, de manière grossière, comme des « paramètres matériau » de même valeur pour tous les joints [2]. Il est relativement rare que l'influence de l'anisotropie cristallographique sur ces grandeurs physiques soit étudiée ou prise en compte [3], et lorsqu'elle l'est, elle est en général imposée arbitrairement au lieu de dépendre de réelles caractéristiques cristallographiques et topologiques des joints de grains [4].

Pourquoi considérer cette anisotropie ? Certains phénomènes microstructuraux ne peuvent pas s'expliquer autrement que par l'existence de ces hétérogénéités dans la description des énergies ou/et mobilités des joints de grains. L'apparition de macles thermiques, joints de grains particuliers de très basse énergie [5], pendant les traitements de recristallisation et de croissance de grains en est un exemple flagrant. Or, les joints de macles peuvent jouer un rôle important vis-à-vis de certaines propriétés, e.g. [6]. Prendre en compte les joints de macles, ou d'autres joints particuliers, dans les prévisions issues de simulations métallurgiques, suppose de pouvoir définir proprement et gérer dans la résolution des propriétés interfaciales anisotropes.

La complexité de prendre en compte cette anisotropie trouve son origine dans la complexité même de la structure

des joints de grain. Un joint de grain a une définition qui dépend de l'échelle à laquelle on l'étudie. On peut ainsi le décrire à l'aide de cinq paramètres à l'échelle mésoscopique [7]. Ces cinq paramètres comprennent trois paramètres « cristallographiques » pour décrire la désorientation entre les grains adjacents et deux paramètres « topologiques » pour décrire la normale au joint. Une fois une définition du joint de grains choisie, il faut relier son énergie et sa mobilité à cette description [5]. Cette étape est essentielle, mais non triviale. Le lien entre les caractéristiques du joint et son énergie n'est pas encore bien établie.

Ce travail propose donc une simulation de croissance de grains qui dépend d'une énergie de joint de grains anisotrope, quelle qu'elle soit. Cette énergie évolue avec les paramètres topologiques et cristallographiques calculés localement au niveau des joints de grains. Des simulations où l'énergie des joints de grains dépend de la désorientation existent dans la littérature, mais, à la connaissance des auteurs, aucun article ne reporte de simulations en champ complet avec dépendance à l'inclinaison du joint.

Méthodologie

Une description level-set [2] du problème est adoptée, avec une résolution par éléments finis (EF) sur maillages non structurés. La description level-set de la microstructure est la suivante :

Soit Ω le domaine simulé et Γ le domaine du joint de grain. On peut définir un champ distance représentatif d'un grain i :

$$\varphi_i(M \in \Omega) = \pm d(M, \Gamma)$$

où d est la distance euclidienne entre un point du domaine M et la surface du grain. La convention de signe φ_i positive à l'intérieur d'un grain et négative à l'extérieur est ensuite généralement adoptée. Le joint de grains est ainsi implicitement décrit par l'isovaleur zéro de la fonction distance qui est une fonction level-set particulière. Dans ce cadre, nous pouvons extraire les cinq paramètres des joints.

La normale unitaire sortante au joint de grains peut être définie comme :

$$\vec{n}_i = -\vec{\nabla}\varphi_i$$

Le signe négatif provenant ici de la convention de signe et le caractère unitaire du gradient par la propriété métrique particulière des fonctions distances ($\|\nabla\varphi_i\| = 1$). La désorientation entre deux grains peut être exprimée comme un quaternion de rotation :

$$q_{ij} = o_i o_j$$

où o_i est le quaternion de rotation représentant l'orientation du grain i . Dans le cadre level-set considéré, le problème de croissance de grains peut alors être résolu en considérant l'équation de convection suivante [8] :

$$\vec{v}_i = \mu_{ij}(q_{ij}, \vec{n}_i) \gamma_{ij}(q_{ij}, \vec{n}_i) K_i \frac{\partial \phi_i}{\partial t} - \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \phi_i = 0$$

où μ_{ij} , γ_{ij} et K_i sont respectivement la mobilité, l'énergie et la courbure du joint de grains, v_i sa vitesse et l'indice j faisant référence aux grains voisins. Sous certaines conditions (réinitialisation systématique des fonctions level-set lors de la résolution), cette équation de convection peut être résolue sous une forme diffusive [9]. Nous pouvons ainsi résoudre le problème anisotrope à chaque intervalle de temps à l'aide d'une formulation éléments finis.

Premiers résultats

Le cas test illustré sur la figure 1 correspond à un grain circulaire immergé dans une matrice en deux dimensions. Une dépendance de l'énergie de joint de grains à l'inclinaison du joint est imposée, comme le montre le tracé de Wulff. L'énergie du joint dépend elliptiquement de l'angle créé par la normale et l'axe x de la simulation.

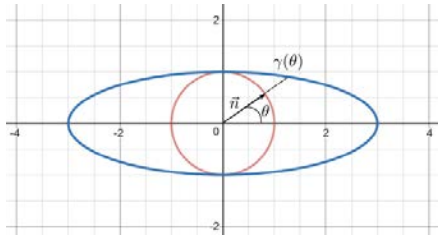


Figure 1. Grain circulaire (rouge) et tracé de Wulff (bleu) de l'énergie de joint de grains anisotrope imposée.

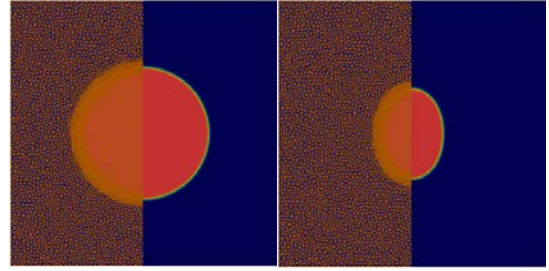
On pourrait caractériser ce tracé par son rapport d'anisotropie :

$$r_{aniso} = \frac{\gamma_{max}}{\gamma_{min}}$$

ici, r_{aniso} est égal à 3 avec γ_{min} adimensionnée (=1). La mobilité est également adimensionnée et imposée à 1, quel que soit la normale au joint. Un pas de temps adimensionné de 0,01 est utilisé, sur une durée totale de simulation fixée à 0,5. Le maillage subit un remaillage anisotrope en fonction de la fonction distance au joint de grains à chaque pas de la simulation. Lors de la simulation le grain, circulaire au départ, devient de plus en plus elliptique. Les états initiaux et finaux sont montrés sur la figure 2. Ce cas test illustre la capacité du cadre numérique présenté à prendre en compte l'anisotropie de l'énergie le long du joint de grains. Des cas plus élaborés (jonctions triples, polycristaux 2D et 3D, etc.) avec prise en compte d'un modèle d'énergie dépendant de la désorientation de type Read-Shockley [10] seront présentés.

Conclusions et perspectives

Les raisons et la méthodologie du développement du calcul de croissance de grains anisotrope ont été présentées. Si il semble clairement établi qu'une simulation intégrant une anisotropie adaptée peut être plus riche qu'une simulation



(a)

(b)

Figure 2. Etat initial (a) et état final (b) de la simulation de l'évolution du grain circulaire de la figure 1 sous l'effet de la capillarité, avec énergie de joint anisotrope.

isotrope, il reste à définir dans l'état de l'art un modèle d'anisotropie proche de la réalité. L'énergie de joints de grains ne bénéficie pas aujourd'hui d'un modèle robuste et testé dans la littérature pour fournir des prévisions réalistes sur toutes les configurations possibles de joints de grains. Ce travail porte donc l'ambition d'une description physiquement et mathématiquement pertinente des énergies de joints de grains à l'échelle polycristalline et son intégration dans le formalisme champ complet de type level-set.

Remerciements

Ce travail a été réalisé dans le cadre de la chaire industrielle ANR-Safran OPALE.

Références

- [1] F. H. a. M. Hatherly, Elsevier, 2004.
- [2] B. Scholtes, Thèse de Doctorat MINES Paristech, Paris: PSL, 2016.
- [3] Y. Jin, Thèse de doctorats MINES Paristech, Paris: PSL, 2014.
- [4] L.-Q. C. C. E. K. I. N. M. Kunok Chang, *Computational Materials Science*, n° %1127, pp. 67-77, 2016.
- [5] S. M. F. a. E. A. H. David L. Olmsted, *Acta Materialia*, n° %157, pp. 3694-3703, 2009.
- [6] J. C. a. P. V. Damien Texier, *Material Science and Engineering*, n° %1678, pp. 122-136, 2016.
- [7] R. B. A.P Sutton, New York: Oxford University Press, 1995.
- [8] C. Herring, Berlin: Springer, 1999.
- [9] R. L. R. C. M. Bernacki, *Scripta Materialia*, n° %164, pp. 525-528, 2011.
- [10] W. T. R. a. W. Shockley, *Physical Review*, n° %178, pp. 275-289, 1950.