

MODÉLISATION DE LA RECRISTALLISATION

Oguz Umut Salman, LSPM (Université Paris 13/CNRS UPR 3407)

Benoît Appolaire, LEM (Onera/CNRS UMR 104)

Kais Ammar, CdM (Mines ParisTech/CNRS UMR 7633)

CONTEXTE ET OBJECTIF

L'évolution de la microstructure des alliages métalliques soumis à des chargements combinés thermiques et mécaniques est caractérisée par les phénomènes d'écroissage, de restauration statique et dynamique, de **recristallisation** et de croissance de grains. La compréhension et la prévision de ces mécanismes est nécessaire pour un contrôle rigoureux des propriétés mécaniques des composants industriels et de leur optimisation notamment par le biais du formage.

La tâche est particulièrement complexe parce que les phénomènes cités impliquent tous les défauts des structures cristallines monophasées, lacunes, dislocations, joints de grains, et ce à toutes les échelles. En toute généralité, il est ainsi nécessaire de prendre en compte le mouvement des dislocations, que ce soit par glissement ou par montée impliquant la diffusion des lacunes, leur auto-organisation, leur interaction avec les joints grains, et le mouvement de ces derniers qui présente une grande variabilité suivant leur nature, dont il n'existe pas de description unifiée satisfaisante.

Il est clair, à la vue de cette liste, qu'il s'agit d'un travail de longue haleine, et qu'aucun modèle n'est actuellement en mesure d'englober tous ces aspects. Il n'en existe pas moins un certain nombre de tentatives qu'on peut classer en deux grandes catégories : d'une part les modèles reposant sur des grandeurs moyennes et scalaires qui restent qualitatifs ; d'autre part des modèles en champ complet dont l'objectif est de saisir la complexité de l'évolution de la microstructure (par ex. [1, 2, 3]).

À l'heure actuelle, tous les modèles en champ complet buttent sur la difficulté de définir des lois de germination et de migration. L'origine en est l'absence de cadre thermodynamique permettant de décrire tous les phénomènes impliqués dans la recristallisation, comme c'est le cas pour les transformations de phase. L'objectif de ce projet est donc de **développer un cadre de modélisation**, formulé comme une théorie des champs mécaniques et physiques sur une base **thermodynamique** cohérente et intégrant les mécanismes principaux impliqués dans la **recristallisation**, à savoir déformation viscoplastique, restauration et mouvement des joints de grains.

DÉMARCHE

Le projet s'appuiera sur une **démarche à deux échelles** : d'une part en enrichissant un modèle de **champ de phase** par un modèle de **Cosserat** à l'échelle mésoscopique ; d'autre part en recourant à une **nouvelle approche** permettant d'étudier **l'auto-organisation des dislocations** à une échelle plus fine, afin de guider la construction du modèle mésoscopique.

Le projet s'articulera donc en deux parties, que nous mènerons en parallèle.

En premier lieu, il s'agira d'améliorer un modèle de champ de phase développé précédemment dans le travail de thèse de Guillaume Abrivard [1]. Ce modèle repose actuellement sur deux champs (en 2D) : la désorientation locale du réseau cristallin et la cristallinité, liée à une densité de défauts. En formulant une énergie libre fonction de ces deux champs, il est possible d'identifier les forces motrices associées à leurs évolutions. La mise en œuvre de ce modèle dans le code de calcul par éléments finis ZSet software a donné des résultats encourageants (Fig. 1a), en post-traitement d'un calcul de plasticité cristalline. Malheureusement, le couplage direct n'est pas réalisable en l'état parce que la désorientation locale du champ de phase n'est pas liée à celle déduite des calculs de plasticité. Nous remédierons donc à cela en associant le modèle de champ de phase à un modèle de Cosserat pour la plasticité cristalline, dans le même cadre thermodynamique. L'implémentation sera réalisée dans Zset software.

Parallèlement, nous aborderons le problème à plus petite échelle en vue de consolider les hypothèses du modèle de champ de phase mésoscopique, en apportant une compréhension plus fine de certaines situations simples et bien contrôlées. Pour ce faire, nous mettrons en œuvre une approche nouvelle, basée sur un formalisme à la Landau, décrivant les dislocations par un paramètre d'ordre pertinent lié aux déformations du réseau cristallin. La formulation actuelle [4] sera étendue au cadre des grandes déformations afin de traiter correctement les rotations associées aux joints de grains (Fig. 1b).

Enfin, nous choisirons des calculs de référence simples réalisables avec les deux approches, comme le cas de deux grains séparés par des joints de flexion de faible désorientation, présentant deux densités de dislocations

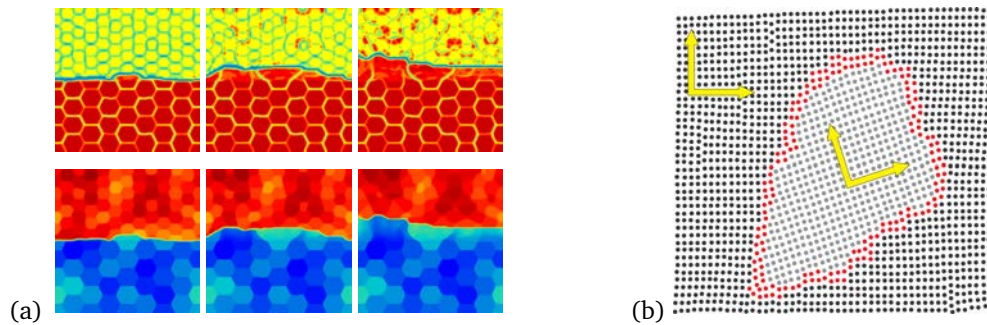


FIGURE 1 – (a) Simulation de migration induite (SIBM) par le modèle d'Abrivard [1] : évolution du champ de cristallinité (haut) et de l'orientation (bas). (b) Simulation préliminaire d'un nanograin obtenue par minimisation de l'énergie élastique en grandes déformations construite par réduction de Lagrange sur une grille atomistique.

différentes.

RÉSULTATS ATTENDUS ET PERSPECTIVES

- ✓ Modèle mésoscopique opérationnel pour étudier les phénomènes de recristallisation dans un cadre théorique unique, c'est-à-dire sans recours à des couplages entre méthodes de natures différentes avec les difficultés numériques afférentes.
- ✓ Modèle à la Landau pour les dislocations, formulé en grandes déformations pour prendre en compte les rotations associées aux joints de grains.
- ✓ « Mise en place d'une méthodologie de changement d'échelle numérique pour l'identification des champs du modèle mésoscopique et la construction des potentiels associés.

Le caractère exploratoire de ce projet est indéniable, de par la nature même des modèles qu'on souhaite développer. Il n'en reste pas moins qu'il permettra d'initier une collaboration forte et à long terme entre des équipes aux compétences complémentaires sur une thématique au fort potentiel applicatif. Par ailleurs, si le projet est essentiellement théorique, il bénéficiera de l'environnement expérimental du LSPM (thèses en cours de B. Beucia et S. Easeng).

LES ACTEURS

- ✓ **Oguz Umut Salman** (CR CNRS, LSPM), travaille sur des modèles de type Ginzburg-Landau pour les transformations displacives et les dislocations. Il s'intéresse plus particulièrement aux phénomènes d'auto-organisation des dislocations et des fissures.
- ✓ **Benoît Appolaire**, (MR Onera, LEM), travaille des les approches par champ de phase, en particulier pour les transformations de phase à l'état solide impliquant élasticité et plasticité. Il a été impliqué dans la construction du modèle de Guillaume Abrivard.
- ✓ **Kais Ammar** (IR Armines, CdM), travaille au développement du code de calcul par éléments finis Zset software, en y incorporant notamment les modèles de type champ de phase et Cosserat.
- ✓ Le **post-doctorant** participera au développement des deux modèles, et à la réalisation des calculs.

BUDGET : 50 k€ SUR 12 MOIS

- ✓ Salaire post-doctorant : 41 k€
- ✓ Ordinateur portable post-doctorant : 3 k€
- ✓ Participation au cluster de Paris 13 : 6 k€

RÉFÉRENCES

- [1] G. Abrivard, E. Busso, S. Forest, B. Appolaire. *Phil. Mag.* 92 :3618–3642 ; 3643–3664, 2012.
- [2] M. Montagnat, O. Castelnau, P. Bons, S. Faria, O. Gagliardini, F. Gillet-Chaulet, F. Grennerat, A. Griera, R. Lebensohn, H. Moulinec, J. Roessiger, P. Suquet. *J. Struct. Geol.* 61 :78–108, 2014.
- [3] L. Chen, J. Chen, R. Lebensohn, Y. Ji, T. Heo, S. Bhattacharyya, K. Chang, S. Mathaudhu, Z. Liu, L.Q. Chen. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* 285 :829–848, 2015.
- [4] O. Salman, L. Truskinovsky. *Phys. Rev. Lett.* 106 :175503, 2011.