



HAL
open science

Modélisation par transition d'échelles de la nanostructuration d'un acier 316L par le procédé SMAT

Souhail Ben Afia, Delphine Retraint, Benoît Panicaud, Emmanuelle Rouhaud,
Arjen Roos, Léa Le Joncour, Mathieu Micoulaut

► To cite this version:

Souhail Ben Afia, Delphine Retraint, Benoît Panicaud, Emmanuelle Rouhaud, Arjen Roos, et al..
Modélisation par transition d'échelles de la nanostructuration d'un acier 316L par le procédé SMAT.
11e colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2013, Giens, France. hal-01717107

HAL Id: hal-01717107

<https://hal.science/hal-01717107>

Submitted on 25 Feb 2018

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.

Public Domain

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 par transition d'échelles de la nanostructuration d'un acier 316L par le procédé SMAT

Souhail BEN AFIA¹, Delphine RETRAINT², Benoît PANICAUD³, Emmanuelle ROUHAUD⁴,
Arjen ROOS⁵, Léa LE JONCOUR⁶, Mathieu MICOULAUT⁷

1 Université de Technologie de Troyes (UTT), 12 rue Marie Curie, 10010 Troyes, souhail.ben_afia@utt.fr

2 Université de Technologie de Troyes (UTT), 12 rue Marie Curie, 10010 Troyes, delphine.retraint@utt.fr

3 Université de Technologie de Troyes (UTT), 12 rue Marie Curie, 10010 Troyes, benoit.panicaud@utt.fr

4 Université de Technologie de Troyes (UTT), 12 rue Marie Curie, 10010 Troyes, emmanuelle.rouhaud@utt.fr

5 Université de Technologie de Troyes (UTT), 12 rue Marie Curie, 10010 Troyes, arjen.roos@utt.fr

6 Université de Technologie de Troyes (UTT), 12 rue Marie Curie, 10010 Troyes, lea.le_joncour@utt.fr

7 Université Pierre et Marie Curie (UMPC), 4 place Jussieu, 75252 Paris, mmi@lptl.jussieu.fr

Résumé —

Le procédé de nanocristallisation superficielle SMAT (Surface Mechanical Attrition Treatment) est un procédé dont le principe est proche de grenailage ultrason. Il permet de nanocristalliser la surface de la pièce traitée sur quelques dizaines de micromètres. Ce traitement est reconnu pour l'amélioration considérable des propriétés de surface des matériaux ainsi traités (dureté, résistance à la fatigue...). Cette efficacité a été démontrée sur de nombreux alliages métalliques comme l'acier, ou sur des métaux purs comme le cuivre. Toutefois, le SMAT dépend de nombreux paramètres qui peuvent rendre difficile sa bonne utilisation. Afin de maîtriser et d'étudier les effets qu'il introduit, une démarche de calcul permettant de simuler l'ensemble du procédé est présentée. Dans un premier temps, la mise en œuvre d'un modèle de gaz granulaire, qui donne accès aux trajectoires des billes, permet de prédire l'influence des différents paramètres sur la distribution des impacts à la surface d'une pièce. L'amplitude de vibration et la masse totale de billes sont identifiées comme les paramètres clés pour optimiser les conditions de traitement. Dans un second temps, en se ramenant à l'analyse de l'impact d'une seule bille sur un matériau homogène équivalent, il est finalement possible d'obtenir le champ de déplacement macroscopique local, aussi bien que le champ de déplacement global de la surface impactée, tenant compte de la statistique des différents impacts. Une modélisation micromécanique basée sur l'évolution des densités de dislocations est enfin utilisée pour simuler le raffinement des grains.

Mots clés — micromécanique, simulation par éléments finis, nanocristallisation, SMAT

1. Introduction

Le procédé SMAT est un traitement mécanique à froid qui consiste à projeter des billes de dureté élevée sur la surface des pièces à traiter. Durant ce traitement, les billes sont initialement contenues dans une enceinte délimitée par une sonotrode et un carénage. La sonotrode vibrant à haute fréquence projette aléatoirement les billes qui viennent impacter la surface de la pièce. Elles provoquent ainsi des déformations plastiques superficielles. Par conséquent, ces impacts répétés entraînent un écrouissage superficiel, l'apparition de contraintes résiduelles de compression sur une couche superficielle et la génération d'une nanostructure sur quelques dizaines de microns [1]. A travers ces changements métallurgiques, le traitement permet d'améliorer le comportement mécanique des pièces (comme, la tenue en fatigue [2] ou encore la résistance à la corrosion [3]). Néanmoins, les contraintes résiduelles induites et les caractéristiques de la couche nanostructurée sont fortement liées aux paramètres du procédé, comme les vitesses d'impact des billes, les angles d'impact et le taux de recouvrement. Ceux-ci dépendent à leur tour des paramètres machines, tels que l'amplitude de

vibration de la sonotrode, le diamètre de bille, la géométrie de l'enceinte, etc. Il faut noter également que la nature du matériau traité influence fortement les résultats du traitement. Cela peut s'expliquer par la dépendance entre les mécanismes de nanostructuration et les propriétés physiques et mécaniques du matériau. Cependant, en raison de la complexité de la dynamique des billes dans l'enceinte et de la lourdeur des expériences menées pour caractériser le gradient de la microstructure induit, très peu d'informations sont connues sur les mécanismes de raffinement des grains dans n'importe quel matériau suite au traitement SMAT.

2. Démarche globale de la modélisation

Le but de cette étude consiste à développer un chaînage numérique complet qui prend en compte les paramètres du procédé et les propriétés mécaniques du matériau, afin de prévoir les caractéristiques de la nanostructure générée suite au traitement SMAT. Afin d'étudier la dynamique des billes, des techniques expérimentales sont actuellement utilisées. Néanmoins ces méthodes sont très coûteuses et ne caractérisent pas efficacement les trajectoires des billes. Pour cette raison, un modèle de la dynamique des billes, basé sur des modèles de gaz granulaires, a été développé [5]. Celui-ci permet de simuler le traitement SMAT sur des pièces simples. En calculant la trajectoire de chaque bille, il est possible de simuler des milliers d'impacts sur la surface de la pièce et de réaliser des études statistiques sur les vitesses et les angles, ainsi que sur la fréquence et la distribution de ces impacts. Ces distributions seront utilisées comme entrées dans des simulations numériques ultérieures d'impact de bille. Par ailleurs, une approche micromécanique couplée à un calcul par éléments finis est mise en œuvre pour donner l'évolution de la taille de grain en prenant en compte les dislocations et de leurs interactions.

La démarche globale est représentée dans la figure 1, où un cas d'application à une enceinte de géométrie cylindrique est détaillé. Suivant cette approche, il est possible d'avoir une idée sur l'évolution de la taille des grains en fonction des paramètres du procédé et des propriétés du matériau de la pièce traitée. Les vitesses et les angles d'impacts obtenus par le modèle 3D de dynamique des billes serviront d'entrées dans la deuxième étape pour simuler, avec un code de calcul par éléments finis, les impacts des billes. Suite à cette simulation, le champ de déplacement résultant est utilisé dans un second calcul par éléments finis, couplé à l'approche micromécanique en tenant compte de différentes densités de dislocations. Le but est finalement de prédire le raffinement des grains.

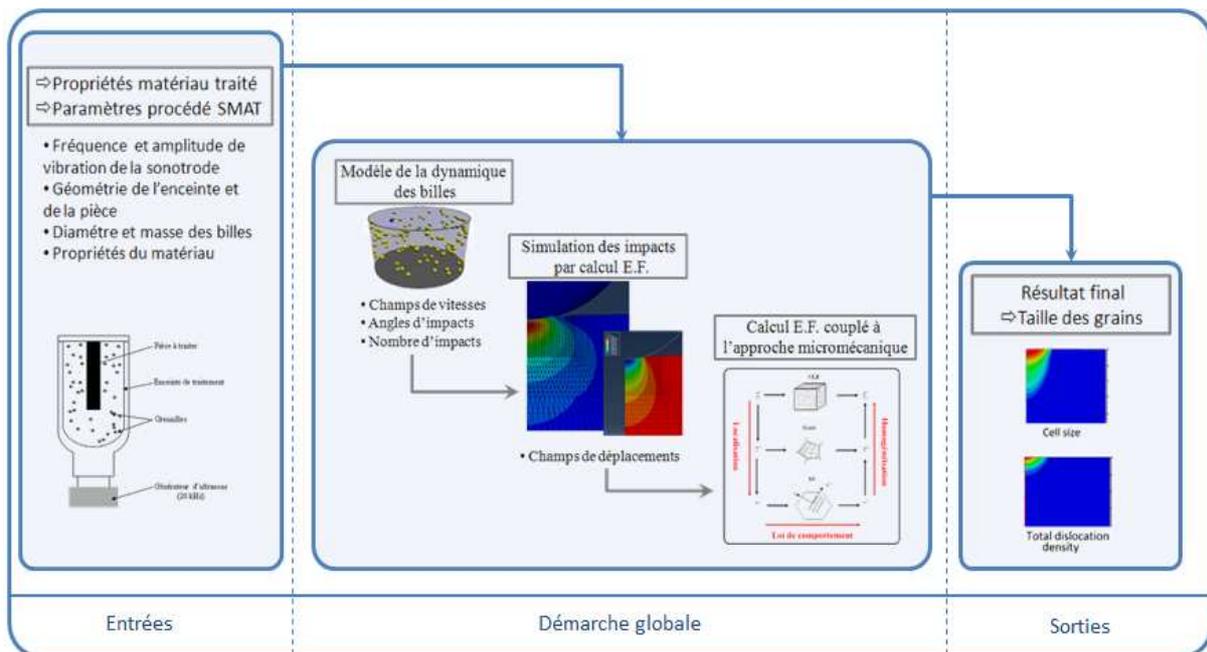


Fig. 1 – Démarche globale de la modélisation

3. Modèle de dynamique des billes

L'objectif de la première étape de cette démarche consiste donc à extraire à partir du modèle de dynamique des billes, les distributions des vitesses et des angles d'impacts correspondants aux paramètres machines choisis par l'utilisateur. Le modèle de dynamique des billes est basé sur un modèle qui a été créé à l'origine pour les gaz granulaires [5]. Les entrées du modèle correspondent aux paramètres machines suivants :

- La fréquence et l'amplitude de vibration de la sonotrode ; le profil d'excitation étant triangulaire.
- Les propriétés du matériau des billes, de la sonotrode, de la pièce et de l'enceinte.
- La quantité et le diamètre des billes.
- La géométrie de la pièce et de l'enceinte.

Le modèle utilisé dans cette étape simule la dynamique de sphères rigides placées dans une enceinte cylindrique et propulsées vers une surface plane par une membrane vibrante, comme le montre la figure 2-a (ou dans une enceinte prismatique comme le montre la figure 2-b). Dans cette figure, les sphères de couleur jaune représentent les billes.

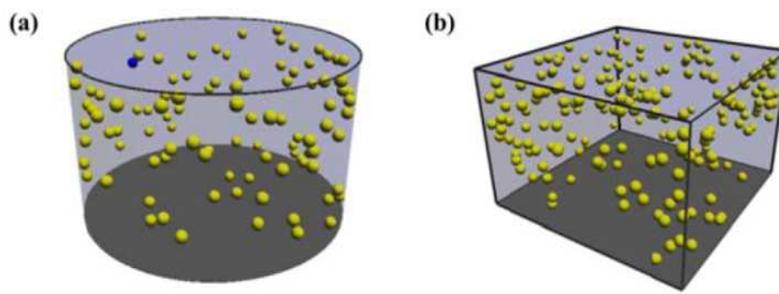


Fig. 2 - Exemples de géométries d'enceinte pris en charge par le modèle: a) Cylindrique b) Prismatique [6]

Une simulation par dynamique moléculaire, utilisant un algorithme par évènements, [5] permet de fournir la trajectoire des sphères. Pour chaque impact, le modèle enregistre le type, l'instant et les coordonnées 3D, ainsi que la vitesse avant et après impact. En simulant des milliers d'impacts sur la surface traitée, la simulation permet de réaliser des études statistiques sur les vitesses et les angles, ainsi que sur la fréquence et la distribution des impacts. Le modèle détecte les collisions entre bille-bille et celles entre les billes et les différentes parois de l'enceinte. Il prend en compte leurs interactions par contact ainsi que leur éventuel frottement solide. En simulant quelques dizaines de secondes de traitement sur la pièce traitée, on a pu faire une étude statistique sur les distributions des vitesses et des nombre d'impacts. Ces résultats sont présentés dans les figures 3 à 6.

Les conditions du traitement (paramètres machines) sont résumées par le tableau suivant :

Diamètre de l'enceinte	Hauteur de l'enceinte	Diamètre de bille	Masse des billes	Fréquence de vibration
D = 70 mm	H = 45 mm	Ø = 3 mm	Q = 20 g	Fr = 20 kHz

Tableau 1 – Conditions du traitement utilisés dans le modèle de dynamique de bille

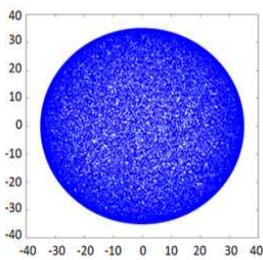


Fig. 3 – Distribution spatiale des impacts

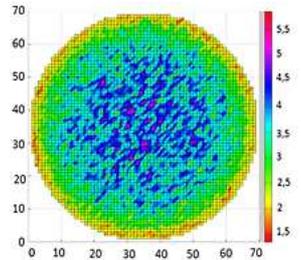


Fig. 4 – Distribution spatiale des vitesses d'impacts (m/s)

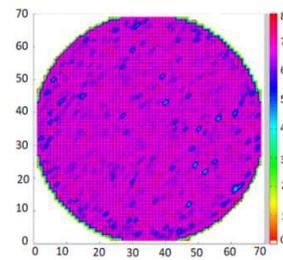


Fig. 5 – Distribution spatiale des vitesses maximales (m/s)

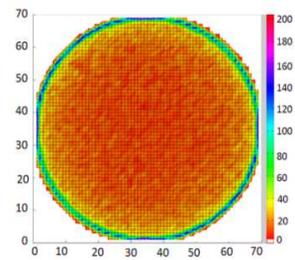


Fig. 6 – Distribution spatiale du nombre d'impacts

La surface de la pièce traitée est divisée en petits éléments par l'intermédiaire d'une grille de base (1 mm x 1 mm). Pour chaque élément de la grille, la vitesse moyenne de tous les impacts est calculée, ainsi que le nombre d'impacts et leur vitesse maximale (voir aussi figure 5). La vitesse d'impacts correspond à la norme du vecteur vitesse. On constate que la distribution de la vitesse moyenne est hétérogène comme le montre la figure 4, contrairement à la vitesse maximale qui semble être beaucoup plus homogène (figure 5). On peut noter également que la vitesse d'impacts est plus élevée au centre de la pièce (5,5 m/s) que sur les bords (2 m/s). Par rapport au nombre d'impacts, on peut remarquer qu'il y a plus d'impacts lorsque on se rapproche du bord. Cela peut être expliqué par l'observation faite à côté des parois de l'enceinte ; il y a moins de collisions entre billes et de ce fait celles-ci gardent des trajectoires hélicoïdales dirigées vers le bas [5].

La figure 7 représente la distribution de la vitesse d'impacts sur la pièce traitée, pour différentes amplitudes de vibration de la sonotrode. Cette distribution correspond au pourcentage d'impacts pour différentes vitesses variant entre zéro et la vitesse maximale (par exemple une vitesse de 2 m/s pour une amplitude de vibration de la sonotrode de 6 μm). Cette figure montre l'existence de deux pics de vitesse pour certaines amplitudes de vibration (dus principalement à la forme triangulaire du profil d'excitation de la sonotrode). Elle montre aussi que pour une augmentation de l'amplitude de vibration de la sonotrode, les pics de pourcentage d'impacts diminuent tandis que les vitesses des impacts augmentent.

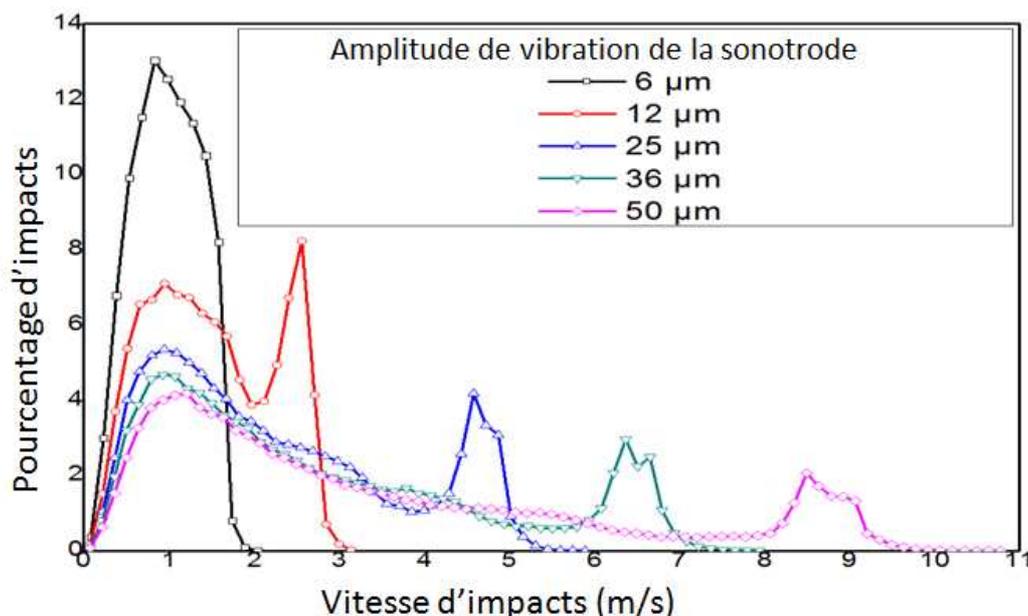


Fig. 7 – Influence de l'amplitude de vibration de la sonotrode sur le pourcentage d'impacts exprimé en fonction de la vitesse d'impacts

4. Simulation des champs de déplacements locaux dus aux impacts utilisant un calcul par éléments finis

Les résultats obtenus par le modèle de la dynamique des billes sont utilisés, dans cette deuxième étape, comme entrées pour un calcul par éléments finis. L'objectif de cette simulation est d'étudier l'effet d'un ou de plusieurs impacts sur un massif semi-infini par l'intermédiaire du code Abaqus-Explicit. Le calcul a été réalisé en 2D axisymétrique, appliqué à un modèle élastoplastique. Le matériau étudié est un acier inoxydable austénitique 316L.

Une bille de diamètre 3 mm, semblable à celles utilisées dans le modèle de la dynamique des billes, est représentée géométriquement comme une sphère infiniment rigide. Son centre est défini comme point de référence pour le calcul. La vitesse et l'angle d'impact sont définis comme conditions aux limites, en fonction des distributions extraites de la première étape. Un critère de contact de type Coulomb a été utilisé, avec un coefficient de frottement isotrope égal à 0,3. En tenant compte des symétries, seule la moitié du massif a été analysée. La pièce a été bridée pour éliminer tout mouvement de corps rigide. Des tests de convergence ont été effectués en utilisant différents types de maillages, afin d'assurer des résultats numériques cohérents. La figure 8 montre un exemple de résultat issu de la simulation par éléments finis.

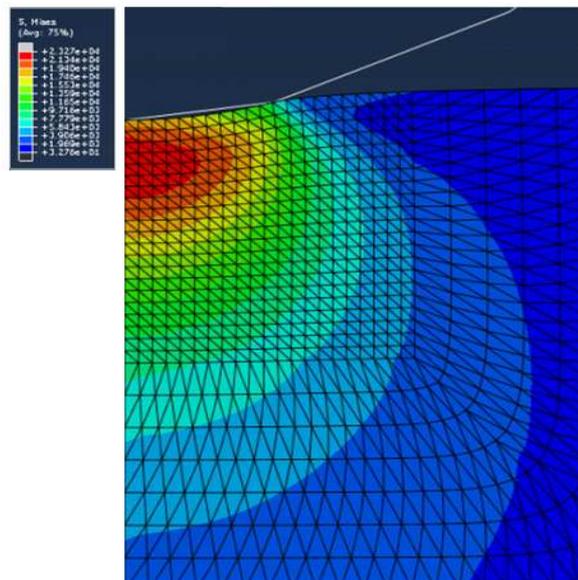


Fig. 8 – Distribution des contraintes de Von Mises suite à l'impact normal d'une bille

Le but de cette étape est de récupérer les champs de déplacements résultants sur le massif, après l'impact d'une ou plusieurs billes. Par la suite, ces champs de déplacements sont utilisés comme conditions aux limites dans une autre simulation basée sur une approche micromécanique.

5. Approche micromécanique et modèle d'évolution des dislocations

Afin de modéliser le raffinement des grains et prévoir les tailles des grains dans chaque VER (volume élémentaire de référence), un modèle traduisant l'évolution des densités de dislocations est incorporé dans une approche de transition d'échelles. La troisième étape consiste donc à utiliser les résultats précédents afin de prévoir l'évolution de la taille des grains suite à l'impact d'une bille ou plusieurs billes. Dans ce contexte, diverses études ont déjà été menées. Par exemple, pour modéliser le raffinement des grains, Estrin et al [4, 8] suggèrent d'évaluer l'évolution des densités de dislocations à partir d'un ensemble d'équations différentielles. Le même modèle a été appliqué dans le cas du procédé « Equal-Channel Angular Pressing – ECAP » sur divers matériaux, tels que l'aluminium [7], le cuivre [8] ou l'acier [9].

Basé sur les mêmes équations d'évolution des densités de dislocations, d'autres modèles de comportement ont été adaptés pour modéliser la génération de la nanostructure par l'intermédiaire des procédés à taux de déformations plastiques sévères ou à hautes températures, tels que le test de l'impact de Taylor sur le cuivre [10], la compression par choc laser [11] ou la découpe orthogonale sur l'aluminium [12]. Dans la suite de cette section, nous nous limitons à une présentation générale des principales équations définissant le modèle qui peut être intégré à notre approche micromécanique.

Les modèles précédents se basent sur le concept d'équilibre entre le taux d'écroissage généré par la déformation plastique et le taux de restauration provenant de l'annihilation et le réarrangement des dislocations. Pour modéliser l'évolution de la taille des grains, ces modèles introduisent des variables d'état, telles que les densités de dislocations à l'intérieur et sur les parois des cellules formées par regroupement des dislocations. L'évolution de ces densités dépend du taux de déformation et de la fraction des dislocations qui se trouvent sur les parois. Par conséquent, le matériau peut être assimilé à un composite à deux phases : une première constituée de parois cellulaires à forte densité de dislocations et une deuxième constituée par l'intérieur des cellules ayant de relativement faibles densités de dislocations. Deux variables, définissant ces densités de dislocations, sont alors proposées dans ces modèles : la densité de dislocations ρ_c à l'intérieur des cellules et la densité de dislocations ρ_w sur les parois cellulaires. En calculant la répartition de la densité totale de dislocations ρ_t , on peut aboutir à l'évolution de la taille des grains au sein du matériau en utilisant les équations 1 à 5. La densité totale de dislocations sera déterminée à partir de la moyenne volumique des densités dans les deux phases. La taille moyenne des cellules d est supposée évoluer avec l'inverse de la racine carrée de ρ_t [13].

$$d = \frac{K}{\sqrt{\rho_t}} \quad (1)$$

$$\rho_t = f \rho_w + (1-f) \rho_c \quad (2)$$

K est une constante qui dépend du matériau, f est la fraction volumique des parois de dislocations. f_0 est la fraction volumique initiale, f_∞ est la fraction de saturation. $\dot{\gamma}^r$ décrit la variation de f avec le taux de glissement. La quantité $\tilde{\gamma}$ correspond au taux de décroissance de f .

$$f = f_\infty + (f_0 - f_\infty) \exp\left(-\frac{\gamma^r}{\tilde{\gamma}}\right) \quad (3)$$

Cette forme particulière de la fraction volumique, avec f_0 plus importante que f_∞ , implique que les parois des cellules formées deviennent plus nettes lorsque le taux de glissement augmente dans le matériau. L'évolution des densités de dislocations sont gouvernées par les équations suivantes [13]:

$$\dot{\rho}_c = \frac{\alpha^* \dot{\gamma}^r \sqrt{\rho_w}}{\sqrt{3}b} - \frac{6\beta^* \dot{\gamma}^r}{bd(1-f)^{1/3}} - k_0 \left(\frac{\dot{\gamma}^r}{\dot{\gamma}_0}\right)^{-1/n^*} \dot{\gamma}^r \rho_c \quad (4)$$

$$\dot{\rho}_w = \frac{\sqrt{3}\beta^* \dot{\gamma}^r (1-f) \sqrt{\rho_w}}{fb} + \frac{6\beta^* \dot{\gamma}^r (1-f)^{2/3}}{d b f} - k_0 \left(\frac{\dot{\gamma}^r}{\dot{\gamma}_0}\right)^{-1/n^*} \dot{\gamma}^r \rho_w \quad (5)$$

Les premiers termes des équations (4) et (5) correspondent à la génération de dislocations dues à l'activation de la source de Frank-Read. Le deuxième terme traduit le transfert des dislocations de l'intérieur des cellules vers les parois cellulaires. Le dernier représente l'annihilation des dislocations. α^* , β^* et k_0 sont des paramètres du matériau contrôlant le taux d'évolution des densités de dislocations, n est un paramètre sensible à la température, d est la taille de cellules formées, b est la norme du vecteur de Burgers du matériau considéré, $\dot{\gamma}^r$ est le taux de déformation à l'échelle microscopique ; il est calculé à partir du taux de déformation de Von Mises $\dot{\gamma}^r = M \dot{\epsilon}$, où M est le tenseur de Schmidt.

L'ensemble des équations présentées dans cette section (et synthétisé schématiquement sur la figure 9) définit le modèle de comportement du matériau basé sur les mécanismes physiques opérant à l'échelle des dislocations. Ces équations peuvent être alors introduites dans un modèle général micromécanique. Le principal avantage de l'approche utilisant un modèle de transition d'échelle, est de présenter un point de vue plus physique au problème afin de prédire l'évolution de la microstructure (représentée par la densité de dislocations, ainsi que la taille des cellules).

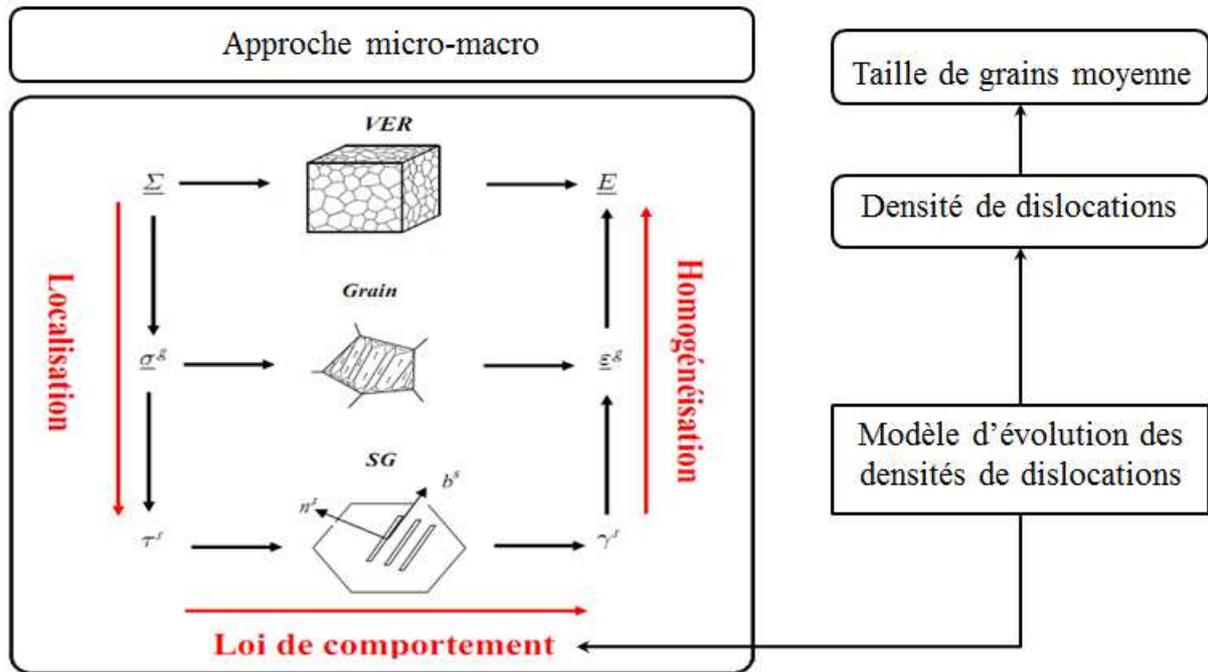


Fig. 9 – Approche micro-macro couplée à un modèle d'évolution des densités de dislocations

6. Conclusion et perspectives

Dans cet article, nous avons présenté une méthodologie générale qui permet de créer un lien entre les paramètres du procédé SMAT et le raffinement des grains induit lors de la nanostructuration. Pendant la première étape, en utilisant un modèle de la dynamique des billes, des études statistiques concernant l'impact et la vitesse des billes ont été effectuées. On peut noter que la vitesse d'impact est plus élevée dans le centre de l'échantillon et que le nombre d'impacts augmente à proximité des frontières. L'étude de l'hétérogénéité est donc de première importance pour un tel processus. L'analyse est réalisée avec différentes amplitudes de vibration de sonotrode. Un modèle prédictif des densités de dislocation peut également être adapté à une approche micromécanique pour simuler les déformations plastiques induites par le procédé et l'évolution de la microstructure générée. Des essais vont être menés afin de tester les limites et les performances de cette méthode de chaînage numérique.

Références

- [1] T. Roland, D. Retraint, J. Lu, K. Lu, Generation of Nanostructures on 316L Stainless Steel and Its Effect on Mechanical Behavior, Mater. Sci. Forum 490-491, 625-630 (2005).
- [2] J. Uusitalo, L.P. Karjalainen, D. Retraint, M. Palosaari, Fatigue Properties of Steels with Ultrasonic Attrition Treated Surface Layers, Mater. Sci. Forum 604-605, 239-248 (2009).
- [3] B.Panicaud, D.Retraint, J.-L. Grosseau-Poussard, L. Li, M. Guérain, P.Goudeau, N.Tamura, M. Kunz, Experimental and numerical study of the effects of a nanocrystallisation treatment on high-temperature oxidation of a zirconium alloy, Cor. Sci. 60, 224-230 (2012).

- [4] Y. Estrin, H. S. Kim, Modelling microstructure evolution toward ultrafine crystallinity produced by severe plastic deformation, *Mater. Sci.* 42, 1512-1516 (2007).
- [5] M. Micoulaut, S. Mechkov, D. Retraint, P. Viot, M. François, Granular gases in mechanical engineering: on the origin of heterogeneous ultrasonic shot peening, *Granul Matter* 9, 25-33 (2007).
- [6] J. Badreddine, S. Remy, M. Micoulaut, E. Rouhaud, V. Desfontaine, F. Chateau, G. Doubré-Baboeuf, P. Renaud, "Cad based simulation of ultrasonic shot peening process". In 12th International Design Conference (Design 2012), 373–380 (2012).
- [7] S.C. Baik, Y. Estrin, H.S. Kim, R.J. Hellmig, Dislocation density-based modeling of deformation behavior of aluminum under equal channel angular pressing, *Mat. Sci. Eng. A* 351, 86-97 (2003).
- [8] S.C. Baik, R.J. Hellmig, Y. Estrin, H.S. Kim, Modelling of deformation behavior of copper under equal channel angular pressing, *Z Metallkd* 94, 754-760 (2003).
- [9] S.C. Baik, Y. Estrin, H.S. Kim, H.T. Jeong, R.J. Hellmig, Calculation of Deformation Behavior and Texture Evolution during Equal Channel Angular Pressing of IF Steel Using Dislocation Based Modeling of Strain Hardening, *Mat. Sci. Forum* 408-412, 697-702 (2002).
- [10] V. Lemiale, Y. Estrin, H.S. Kim, R. O'Donnell, Grain refinement under high strain rate impact: A numerical approach, *Comp. Mat. Sci.* 48, 124-132 (2010).
- [11] H. Ding, Y.C. Shin, Dislocation density-based modeling of subsurface grain refinement with laser-induced shock compression, *Comp. Mat. Sci.* 53, 79-88 (2012).
- [12] H. Ding, N. Shen, Y.C. Shin, Modeling of grain refinement in aluminum and copper subjected to cutting, *Comp. Mat. Sci.* 50, 3016-3025 (2011).
- [13] Y. Estrin, L. S. Toth, A. Molinari, Y. Brechet, A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation, *Acta mater.* 46, 5509-5522 (1998).