

Homogénéisation variationnelle pour l'analyse des déformations à chaud d'aciers biphasés

Nicolas Rupin^{†1}, Michel Bornert[†], Pierre Gilormini[‡], Christophe Pinna* et André Zaoui[†]

[†]Laboratoire de Mécanique des Solides (LMS)
Ecole Polytechnique
91128 Palaiseau Cedex

[‡]Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux (LIM)
ENSAM Paris
151, Bvd de l'Hôpital 75013 Paris

*Institute for Microstructural and Mechanical Process Engineering (IMMPETUS)
The University of Sheffield
Mappin Street, Sheffield S1 3JD
United Kingdom

Résumé :

La définition de processus d'élaboration des matériaux repose sur une approche principalement empirique qui peut s'avérer longue et coûteuse. Afin d'améliorer cette démarche, un outil numérique de prédiction, basé sur l'homogénéisation variationnelle, permettant d'avoir une idée du comportement mécanique et de la configuration cristallographique au cours du formage a été développé ces dernières années. Ce modèle est étendu afin de prendre en compte l'évolution de polycristaux comprenant deux phases cristallographiques distinctes et ainsi de se rapprocher de certains matériaux utilisés en pratique. Un premier exemple est traité ici et comparé à des modélisations plus classiques.

Abstract :

The definition of materials forming processes is based on empirical approaches which can be time consuming and expensive. In order to improve this step, a numerical prediction tool using a variational homogenization method has been developed during these last years, making it possible to have an idea of the material's mechanical response and crystallographic configuration. This modeling is now improved in order to take into account the evolution of two crystallographic phases polycrystals and thus to have a closer approximation of some industrial materials. A first example is treated and compared with more traditional models.

Mots-clefs :

polycristaux ; homogénéisation ; viscoplasticité ; texture ; non linéaire.

1 Introduction

La modélisation du comportement des matériaux au formage est un enjeu économique important. En effet, l'élaboration contrôlée permettrait d'obtenir à moindre coût des produits en parfaite adéquation avec les propriétés recherchées. Dans ce cadre, nous nous intéressons à la modélisation du comportement au laminage à chaud d'agrégats polycristallins présentant deux phases cristallographiques en vue du développement d'un outil numérique de prédiction de textures de laminage. La simulation numérique du comportement mécanique des polycristaux peut se faire principalement en suivant deux approches, l'une déterministe où les caractéristiques

¹rupin@lms.polytechnique.fr

exactes de la structure polycristalline sont connues et introduites dans le modèle ; c'est la démarche utilisée par exemple en éléments finis. L'autre, basée sur une description stochastique du polycristal, plus proche de la connaissance empirique que l'on peut avoir de la microstructure, c'est l'approche qui sera considérée ici dans le cadre de l'homogénéisation non linéaire.

1.1 Extensions non linéaires classiques

De nombreux modèles d'homogénéisation ont été proposés pour estimer le comportement des polycristaux. Les plus simples consistent à considérer comme uniformes les champs de contrainte σ ou de déformation ε dans la microstructure ; ces approches conduisent respectivement aux estimations statique et de Taylor, qui constituent l'équivalent non linéaire des bornes de Reuss et de Voigt pour l'élasticité. Elles ne prennent en compte que la fraction volumique de chacune des phases, en oubliant l'information liée à la distribution spatiale des constituants. Pour améliorer ces modèles, il faut considérer les variations simultanées de σ et $\dot{\varepsilon}$ dans le polycristal. Dans le cas classique où le comportement viscoplastique est lié à un potentiel de dissipation des contraintes u , ceux-ci doivent respecter la loi de comportement $\dot{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \frac{\partial u}{\partial \sigma}(\mathbf{x}, \sigma)$. On a alors à résoudre un problème d'homogénéisation non linéaire. Ce type de problème peut être résolu en se ramenant à un problème d'homogénéisation linéaire par construction d'une «extension non linéaire». Il s'agit de linéariser le comportement local en tout point afin de pouvoir appliquer une procédure d'homogénéisation de matériau hétérogène linéaire. Plusieurs méthodes de linéarisation peuvent être envisagées comme, par exemple, la linéarisation tangente ou la linéarisation sécante $\dot{\varepsilon}(\mathbf{x}) = M^{\text{sct}}(\mathbf{x}, \sigma(\mathbf{x})) : \sigma(\mathbf{x})$. Il est clair qu'une telle approche point par point est trop complexe puisque faisant appel à un champ continûment variable de modules locaux. On se ramène donc à un problème homogène par phase en supposant $\dot{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \sum_r \chi_r(\mathbf{x}) M_r^{\text{sct}} : \sigma(\mathbf{x})$ où $\chi_r(\mathbf{x})$ est la fonction caractéristique associée à la phase r . Il reste alors à choisir le tenseur des modules sécants dans chaque phase. Le modèle sécant classique se base par exemple sur la contrainte moyenne dans la phase pour obtenir M_r^{sct} . Une fois le problème linéarisé, il ne reste plus qu'à choisir le schéma d'homogénéisation permettant de passer au comportement du polycristal. Dans les milieux cristallins, on choisit classiquement l'estimation autocohérente qui considère de façon équivalente toutes les phases, et traduit raisonnablement leurs interactions moyennes, tout en permettant de prendre en compte des paramètres de distribution spatiale, telle que la forme moyenne des grains.

1.2 Homogénéisation variationnelle

Toutefois, le choix de l'utilisation de la valeur moyenne par phase de la contrainte pour définir les modules sécants est arbitraire. On peut améliorer l'étape de linéarisation en utilisant le principe variationnel de Ponte Castañeda [1]. En effet, en se basant sur un critère déduit d'une inégalité variationnelle, il est possible d'optimiser le choix des modules sécants ; la linéarisation se fait alors par minimisation d'une fonction d'un grand nombre de variables.

2 Méthodologie adoptée

L'objectif de notre modèle est d'obtenir la réponse mécanique et l'évolution texturale d'un polycristal viscoplastique au cours de sa mise en forme, par la mise en œuvre de cette technique d'homogénéisation.

2.1 Description du matériau

On considère un acier austéno-ferritique soumis à un laminage à chaud, constitué de deux phases cristallographiques, une phase cubique centrée (CC), la ferrite, et une phase cubique à face centrée (CFC), l'austénite. Ce polycristal est décrit par la donnée des proportions des différentes orientations cristallographiques présentes et par la description de la forme et de l'orientation moyenne des grains. Le polycristal est considéré comme un assemblage de grains parfaitement accolés ; une phase mécanique est définie comme un ensemble de grains de même orientation et de même structure cristallographique. La déformation des monocristaux est régie par les glissements cristallographiques selon les systèmes relatifs à la structure cristalline de chaque constituant. Dans le cadre de notre modèle, leur comportement élastique est négligé et on considère un comportement visqueux en loi puissance de type Norton-Hoff ayant n pour exposant et présentant un seuil de contrainte τ_0 . Le potentiel de dissipation des contraintes pour un système i au sein de la phase r est donné par $\phi_i^r(\tau) = \frac{\dot{\gamma}_0 \tau_0}{1+n} \left(\frac{|\tau|}{\tau_0}\right)^{n+1}$, $|\tau|$ étant la cisssion résolue sur le système, et le potentiel de la phase r est $u^r(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_i \phi_i^r(|\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}_i^r|)$ où $\boldsymbol{\mu}_i^r$ est le tenseur d'orientation lié au système i de la phase r .

2.2 Obtention du comportement

Au sein des monocristaux, le comportement linéarisé peut prendre la forme générale $\mathbf{M}^r(\mathbf{x}) = 2 \sum_i \alpha_i^r(\mathbf{x}) \boldsymbol{\mu}_i^r \otimes \boldsymbol{\mu}_i^r$. Le choix du processus de linéarisation définit l'ajustement des champs $\alpha_i^r(\mathbf{x})$. A l'échelle de la structure, on a, d'après le principe de minimum de l'énergie complémentaire : $\tilde{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \min_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathbb{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})} \left(\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u d\mathbf{x}\right)$, avec $\mathbb{S}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})$ l'ensemble des champs de tenseurs des contraintes statiquement admissibles sur le volume élémentaire représentatif Ω pour la contrainte macroscopique $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$. Dans sa formulation variationnelle Ponte Castañeda a réécrit ce principe [2] en faisant apparaître explicitement le milieu linéaire de comparaison. On obtient ainsi la relation :

$$\tilde{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) = \sup_{\alpha_i^r(\mathbf{x}) \geq 0} \left\{ \hat{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) - \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sum_r \sum_i \chi^r(\mathbf{x}) V_i^r(\alpha_i^r(\mathbf{x})) dV \right\}$$

où \hat{U} décrit le comportement exact du milieu linéaire de comparaison de complaisance locale $\mathbf{M}^r(\mathbf{x})$ et où $\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sum_r \sum_i V_i^r(\alpha_i^r(\mathbf{x})) dV$ traduit l'influence de la non linéarité et est défini par $V_i^r(\alpha) = \sup_{\tau} \left\{ \alpha |\tau|^2 - \phi_i^r(\tau) \right\} = \frac{1}{2} \frac{n-1}{n+1} \tau_0 \dot{\gamma}_0 \left[\frac{2\alpha\tau_0}{\dot{\gamma}_0} \right]^{\frac{n+1}{n-1}}$. En considérant $\alpha_i^r(\mathbf{x})$ constant par phase et égal à α_i^r , on obtient l'inégalité suivante :

$$\tilde{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) \geq \sup_{\alpha_i^r \geq 0} \left\{ \hat{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}}) - \sum_r \sum_i c^r V_i^r(\alpha_i^r) \right\}$$

où c^r est la fraction volumique de la phase r . Dans cette expression $\hat{U}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})$ est maintenant le potentiel de dissipation des contraintes d'un milieu linéaire de comparaison homogène par phase. La maximisation de la fonctionnelle nous conduit ainsi au comportement sécant local optimal par le biais des α_i^r et à une évaluation du comportement macroscopique par $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial \hat{U}}{\partial \bar{\boldsymbol{\sigma}}}(\bar{\boldsymbol{\sigma}})$. Cette démarche conduit au comportement du polycristal dans un état et pour une sollicitation donnés, et a déjà été utilisé dans le cadre de la modélisation sans évolution de texture des polycristaux monophasés [3]. Notons qu'il est possible de la reformuler pour les situations où

l'on n'impose plus la contrainte mais la vitesse de déformation macroscopique. L'évolution de la structure au cours du formage nous oblige à mettre à jour la configuration du polycristal durant le chargement. Cette mise à jour consiste à faire évoluer la texture en considérant la rotation des axes cristallographiques du matériau, à prendre en compte l'évolution de la forme et de l'orientation moyennes des grains et à actualiser la contrainte plastique critique de chaque système en suivant une loi d'écrouissage prédéterminée. Ceci a été réalisé pour les polycristaux ne présentant qu'une phase cristallographique [4], le modèle a été implémenté par P. Gilormini en langage FORTRAN. Ce programme a été modifié dans le cadre de cette étude afin de pouvoir modéliser des polycristaux constitués de grains présentant plusieurs phases cristallographiques. L'une des tâches principales de l'application étant l'optimisation d'une fonction d'un grand nombre de variables, une méthode numérique efficace a été introduite. Le choix s'est porté sur la procédure L-BFGS développée par D.C. Liu et J. Nocedal [5] et qui est librement téléchargeable².

3 Simulation du comportement d'un acier biphasé

Nous allons comparer les résultats issus de notre modèle, pour le comportement d'un acier biphasé, avec d'autres modèles plus classiques comme le modèle de Taylor et les estimations sécantes et tangentes classiques fournies par le logiciel VPSC [6] en termes de comportement macroscopique et d'évolution de texture cristallographique. Il s'agit d'une première approche visant à terme à décrire un cas réel d'aciers austéno-ferritiques sollicités à 1000°C, où l'austénite est sensiblement deux fois plus dure que la ferrite [7]. On réalise la simulation d'un biphasé composé d'une phase CFC avec 12 systèmes de glissements $\{111\} \langle 110 \rangle$ et d'une phase CC avec 12 systèmes de type $\{112\} \langle 111 \rangle$ et 12 systèmes de type $\{011\} \langle 111 \rangle$ les deux phases ayant pour cission critique initiale respectivement $\tau_0^{CFC} = 2$ et $\tau_0^{CC} = 1$, des $\dot{\gamma}_0$ de 1 et des exposants viscoplastiques n identiques égaux à 2. Notons que des matériaux à exposants variables peuvent aussi être traités. Mille grains sont modélisés pour chaque structure cristallographique, ils sont considérés initialement comme équiaxes et d'orientation cristallographique aléatoire ; ainsi le polycristal représenté est de texture morphologique et cristallographique initiales isotropes. La sollicitation macroscopique imposée est décrite par $\dot{\epsilon} = \bar{\epsilon} (\bar{e}_2 \otimes \bar{e}_2 - \bar{e}_3 \otimes \bar{e}_3)$, elle est imposée pendant une durée totale unitaire divisée en 40 incréments. Enfin, aucun écrouissage n'est considéré lors de cette première simulation. La réponse mécanique obtenue est représentée

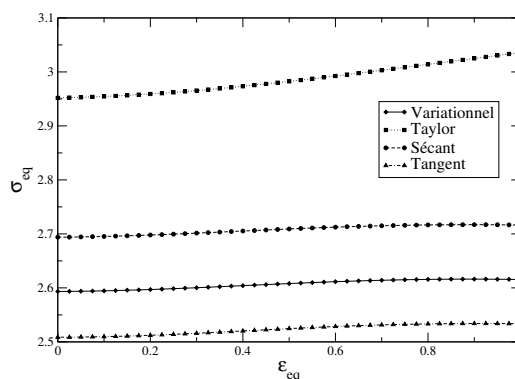


FIG. 1 – Contrainte équivalente en fonction de la déformation équivalente au sens de von Mises pour les différents modèles considérés.

²www.ece.nwu.edu/~nocedal/lbfgs.html

sur la figure 1 donnant les grandeurs équivalentes de von Mises pour les différents modèles considérés. Le comportement mécanique du polycristal selon le modèle variationnel est proche des estimations sécantes et tangentes classiques et évolue entre celles-ci. Les différences peu marquées du point de vue mécanique se retrouvent dans l'évolution de la structure du polycristal comme le montre la comparaison des figures 2 et 3. En effet, la première représente la texture initiale de chacune des phases de la structure cristalline et la seconde l'état cristallin après 40 itérations suivant le modèle considéré. Ces textures ne présentent

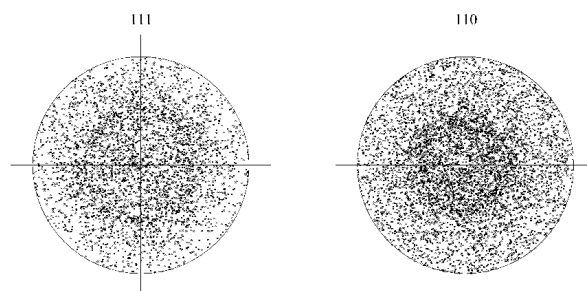


FIG. 2 – Texture cristallographique initiale pour chacune des phases (à droite la phase CC, à gauche la phase CFC).

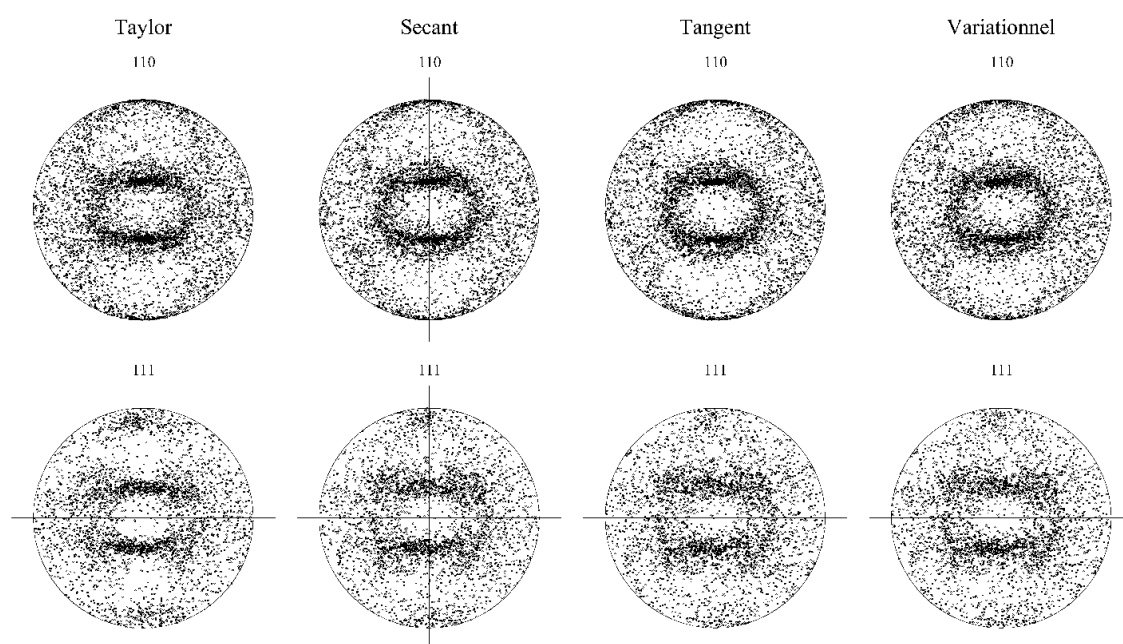


FIG. 3 – Texture cristallographique après simulation pour chacune des phases (CC ligne du haut, CFC ligne du bas) et pour les différents modèles considérés.

pas de différences notables d'un modèle à l'autre. Ainsi l'approche de Taylor, caractérisant une évolution découplée, donne sensiblement le même résultat que les autres formulations, caractérisant une évolution plus ou moins couplée des deux cristallographies. Il semble donc que dans cette configuration, il y ait peu d'interactions entre les phases. Une comparaison plus poussée nécessiterait de quantifier les différences entre ces textures à l'aide d'une fonction de distribution des orientations, mais ceci n'a pas été réalisé dans le cadre de cet essai préliminaire.

4 Conclusions et perspectives

Une évolution du modèle variationnel de prévision du comportement à chaud des polycristaux a été présentée : ce modèle nous permet d'éviter d'avoir à choisir arbitrairement les modules linéarisés lors de la construction du composite linéaire de comparaison et conduit aux modules sécants optimaux. De plus, la prise en compte de plusieurs structures cristallographiques nous permet de modéliser le comportement d'un éventail plus important de matériaux et nous rapproche de certains aciers utilisés dans l'industrie. Un travail important reste à faire sur ce modèle afin d'observer l'influence des différents paramètres et de réaliser une comparaison plus systématique avec d'autres modèles existants et une première confrontation avec l'expérience tant en matière de texture que de déformation locale [8]. Pour cela il conviendra d'identifier des lois de comportement des constituants plus pertinentes que les lois simplifiées utilisées dans cette première approche. Il reste également de nombreux développements à réaliser pour prévoir l'évolution à chaud d'un polycristal : il faudra en particulier bien rendre compte des hétérogénéités intraphases et considérer des phénomènes physiques totalement absents des modèles comme par exemple l'influence du glissement aux joints de grains, l'existence de relations d'orientation entre grains voisins, ou la répartition spatiale relative des deux phases.

Remerciement

Nous tenons à remercier R.A. Lebensohn et C.N. Tomé pour nous avoir permis d'utiliser leur logiciel VPSC dans le cadre de cet essai.

Références

- [1] P. Ponte Castañeda. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 39 :45–71, 1991.
- [2] G. deBotton and P. Ponte Castañeda. Variational estimates for the creep behavior of polycrystals. *Proc. R. Soc. Lond.*, A448 :121–142, 1995.
- [3] M.V. Nebozhyn, P. Gilormini, and P. Ponte Castañeda. Variational self-consistent estimates for cubic viscoplastic polycrystals : the effect of grain anisotropy and shape. *J. Mech. Phys. Solids*, 49 :313–340, 2001.
- [4] Y. Liu, P. Gilormini, and P. Ponte Castañeda. Variational self-consistent estimates for texture evolution in viscoplastic hexagonal polycrystals. *Acta Mater.*, 51 :5425–5437, 2003.
- [5] D.C. Liu and J. Nocedal. On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Math. Programming*, 45 :503–528, 1989.
- [6] R.A. Lebensohn and C.N. Tomé. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys. *Acta Metall. Mater.*, 41 :2611–2624, 1993.
- [7] F.E. Al-Jouni. *Hot deformation and recrystallisation of two-phases steels*. PhD thesis, University of Sheffield, 1983.
- [8] M. Bornert, C. Pinna, J.H. Beynon, and C.M. Sellars. Experimental investigation and micromechanical modeling of the hot deformation of duplex stainless steels. Proceedings of COM 2000, Mathematical modelling in metal processing and manufacturing, 2000.