Une approche semi–topologique pour la modélisation en champs moyens des recristallisations dynamique et métadynamique

David Piot, Guillaume Smagghe, Frank Montheillet, Guillaume Kermouche, Marc Bernacki, Aurore Montouchet, Gilles Perrin

Une approche semi–topologique pour la modélisation en champs moyens des recristallisations dynamique et métadynamique

David Piot[a], Guillaume Smagghe[a], Frank Montheillet[a], Guillaume Kermouche[a], Marc Bernacki[b], Aurore Montouchet[c], Gilles Perrin[c]

[a] Univ Lyon, IMT Mines Saint-Étienne, Centre SMS,
Laboratoire George Friedel UMR CNRS 5307, Département PMM, France
[b] Mines ParisTech, CEMEF, France
[c] AREVA NP, France

RÉSUMÉ

La présente communication présente une partie de la thèse de Smagghe (2017). Elle se concentre sur le développement d'une approche originale semi-topologique pour la modélisation en champs moyens des recristallisations dynamique et métadynamique. Cette démarche générique, qui permet d'utiliser des modèles en champs moyens, chaînés entre eux dans les cas multipasses, pour une prévision précise des distributions de la taille des grains, est illustrée dans le cas particulier du forgeage libre de l'acier inoxydable austénitique AISI 304L pour de grosses pièces de chaudronnerie nucléaire.

INTRODUCTION

La maîtrise de la taille de grain est un *leitmotiv* toujours essentiel lors des opérations de mise en forme et des traitements thermomécaniques pour réaliser les meilleurs compromis de propriétés mais aussi, dans le contexte présent de la chaudronnerie nucléaire, pour assurer la contrôlabilité par ultrasons des pièces massives réalisées.

Les matériaux à faible énergie de faute d'empilement, comme ici les aciers austénitiques, restaurent difficilement et voient leur taille de grain évoluer pendant un procédé multipasse sous l'effet des alternances des recristallisations dynamiques, pendant la déformation proprement dite, et métadynamiques, entre deux coups de presse au même endroit et pendant les réchauffages.

Les efforts de modélisation ont donc porté depuis longtemps sur ces aspects avec le développement, d'abord, de modèles empiriques de type JMAK, puis de modèles physiques simplifiés en champs moyens et enfin de modèles en champs complets avec des méthodes vertex, champs de phases, level-set… Une revue systématique n'a pas sa place dans cette courte communication. Retenons simplement les insuffisances des approches purement empiriques et les temps de calcul prohibitifs des méthodes en champs complets quand il s'agit de les appliquer en chaque point d'une pièce soumise à un procédé hétérogène par nature.

Les modèles en champs moyens offrent ainsi une alternative intermédiaire très pertinente dans un contexte de procédé hétérogène en température, déformation et vitesse de déformation, comme le forgeage libre. Néanmoins, malgré des résultats précis démontrés sur les grandeurs moyennes comme la fraction recristallisée, la contrainte d'écoulement ou la taille moyenne des grains, ils aboutissent, selon les travaux de Montheillet *et al.* (2002), Damamme *et al.* (2010) ou Piot *et al.* (2012), à des distributions de la taille des grains irréalistes pendant la déformation, ce qui est rédhibitoire pour un enchaînement multipasse. C'est pourquoi il a été choisi de développer une approche semi-topologique pour pallier cette difficulté.

APPROCHE EN CHAMPS MOYENS

La base des approches en champs moyens pour modéliser la recristallisation est de considérer que chaque grain est *homogène*, et pris un par un, interagit non pas avec ses grains voisins mais avec un *milieu homogène équivalent* dont les propriétés sont les moyennes de l'agrégat des grains.

Toutes les variantes de ces approches font intervenir (i) une loi de localisation, (ii) une loi de comportement, (iii) une loi de migration des joints de grain, (iv) une loi de germination, et (v) des lois d'homogénéisation. Ici, les plus simples options sont retenues.

(i) Loi de localisation

Il s'agit d'estimer la vitesse de déformation supposée homogène à l'intérieur de chacun des grains à partir de la vitesse de déformation moyenne imposée à l'agrégat. L'hypothèse la plus simple est celle de Taylor dans laquelle tous les grains se déforment à la même vitesse. Notamment, une hypothèse « iso-W » est une alternative.

(ii) Loi de comportement

Il convient de décrire l'évolution de la densité de dislocations pendant la déformation sous les effets de l'écrouissage et de la restauration dynamique mais en l'absence de recristallisation. Le plus simple est d'utiliser un loi dite à une variable interne – la densité de dislocations ρ – comme celle de Kocks–Mecking ou de Laasraoui–Jonas, ou encore ici une simple loi puissance,

$$\mathrm{d}\rho / \mathrm{d}\varepsilon = H^{\nu+1} / \rho^{\nu} \; . \tag{1}$$

Lors d'un maintien en température sans déformation la restauration statique est prise en considération par

$$\dot{\rho} = r_{\mathrm{s}} \left(\rho_{\mathrm{s}} - \rho \right) , \tag{2}$$

où r_{s} est une constante cinétique et ρ_{s} est la densité de dislocations résiduelle qui ne peut être restaurée.

(iii) Loi de migration

La loi de migration dérivée de la thermodynamique des processus irréversibles linéarisée pour les faibles forces motrices suppose que la vitesse de migration est le produit de la mobilité M par la différence d'enthalpie libre par unité de volume – énergie stockée sous forme de dislocations – et de tension superficielle entre le grain d'intérêt et le milieu homogène équivalent, en notant D le diamètre du grain supposé sphérique,

$$\dot{D} = 2M\left[\tau\left(\bar{\rho}-\rho\right)+2\gamma\left(1/\bar{D}-1/D\right)\right], \qquad (3)$$

où τ est l'énergie de ligne des dislocations – l'énergie stockée est considérée comme le produit de τ par la densité de dislocations –, γ est la tension superficielle et les grandeurs avec une barre suscrite les moyennes définies ci-après pour définir le milieu homogène équivalent. La pression de Laplace pour une boule de diamètre D à intégrer dans la force motrice est de $4\gamma/D$. Dans le matériau réel, les joints sont partagés entre deux grains. En modélisant l'agrégat par des sphères isolées, l'aire des joints est artificiellement doublée, la pression de Laplace a donc été divisée par deux pour retrouver la cohérence entre le modèle et la physique. En conditions dynamiques, la tension superficielle est souvent négligée ; en régime de croissance de grains, c'est l'énergie stockée qui est négligée, car déjà restaurée.

(iv) Loi de germination

De nombreuses variantes plus ou moins complexes sont décrites dans la bibliographie. Comme la germination se produit préférentiellement sur les joints de grains (germination en collier), la vitesse de germination dans l'agrégat est supposée ici proportionnelle à l'aire totale des joints de grains. La pratique a montré que prendre la vitesse de germination proportionnelle à $\bar{\rho}^3$ donnait une approximation très simple et suffisante.

(v) Lois d'homogénéisation

La cohérence des approches en champs moyens n'est garantie que sous réserve de la définition conforme des moyennes pour donner les caractéristiques du milieu homogène équivalent.

En ce qui concerne la densité de dislocations, la conservation du volume du système nécessite d'utiliser la moyenne pondérée par l'aire des joints, c'est-à-dire,

$$\bar{\rho} = \left(\sum \rho_i D_i^2\right)\Big/\left(\sum D_i^2\right). \qquad (4)$$

De même pour la taille de grain, les $1/D$ sont à pondérer par les D^2 pour conserver le volume – on parle souvent aussi de taille critique – et ainsi,

$$\bar{D} = \left(\sum D_i^2\right)\Big/\left(\sum D_i\right). \qquad (5)$$

Enfin, selon le modèle de Taylor de durcissement par la forêt, la contrainte d'écoulement dans chaque grain peut être évaluée par $\sigma_i = \alpha\mu b\sqrt{\rho_i}$. En lien avec l'hypothèse de localisation (i) de Taylor, il résulte que la contrainte d'écoulement de l'agrégat doit corrélativement être

$$\sigma = \alpha\mu b\left(\sum \sqrt{\rho_i} D_i^3\right)\Big/\left(\sum D_i^3\right). \qquad (6)$$

Distribution de taille

Au régime stationnaire, dans un modèle en champs moyens tel que ci-dessus, tous les grains suivent la même histoire seulement décalée de leur instant de naissance sur une courbe $D(\rho)$ unique qui passe par un maximum quand la densité de dislocations du grain considéré égale celle du milieu homogène équivalent. La distribution de taille possède ainsi une asymptote verticale, eu égard à cette taille maximale, ce qui s'avère irréaliste.

APPROCHE SEMI-TOPOLOGIQUE

Le but est de conserver le canevas précédent des approches en champs moyens tout en intégrant l'essentiel des effets topologiques sans avoir à gérer explicitement la topologie comme dans un modèle en champs complets. En effet, pour lever la difficulté rencontrée sur la distribution de taille, il est nécessaire d'introduire une stochastique dans la loi de migration déterministe (3). Par exemple, affecter une mobilité aléatoire distribuée autour de la moyenne M à chaque grain lors de sa germination a été tenté fructueusement par Piot *et al.* (2012). Ce résultat préliminaire a encouragé le développement d'une voie plus naturelle en remplaçant le milieu homogène équivalent par un des autres grains. Ainsi chaque grain i se voit assigner, sans se soucier de la réciprocité, un voisin j qui reste fixé jusqu'à ce que l'un des deux grains disparaisse. La nouvelle loi de migration s'écrit ainsi

$$\dot{D}_i = M\left[\tau\left(\rho_j-\rho_i\right)+2\gamma\left(1/D_j-1/D_i\right)\right]. \qquad (7)$$

Noter la division par 2 par rapport à (3). En effet, pour garantir la conservation du volume lorsque la taille du grain i évolue selon (7), la taille du grain j est simultanément modifiée pour compenser le changement de volume du grain i. Chaque grain est maintenant affecté par la migration une fois comme « grain i » et, en moyenne, une fois comme « grain j », il convient donc de diviser par deux la vitesse de migration pour compenser ce double compte. Cette approche semi-topologique a été appliquée avec succès par Smagghe *et al.* (2017) en enchaînant une passe de déformation et un maintien en température tout en validant les distributions de taille obtenues, au contraire de l'approche en champs moyens, ce qui ouvre la voie de simulations précises des procédés industriels complexes hétérogènes et multipasses.

En outre, l'approche a aussi été validée dans Smagghe (2017) par comparaison avec un calcul en champs complets, dans le cas plus simple de la croissance de grain, en utilisant les mêmes paramètres matériaux. La cinétique de croissance du modèle en champs moyens (Hillert) est bien moins rapide que dans le calcul en champs complets alors que celle du modèle semi-topologique coïncide presque parfaitement.

Les auteurs remercient le GdR ReX au sein duquel les échanges ont favorisé la présente étude.

RÉFÉRENCES

G. Smagghe, Modélisation de la recristallisation lors du forgeage à chaud de l'acier 304L – Une approche semi-topologique pour les modèles en champs moyens, thèse Université de Lyon et IMT Mines Saint-Étienne, 2017.

F. Montheillet, J.-P. Thomas, G. Damamme, Congrès Matériaux Tours, 2002.

G. Damamme, D. Piot, F. Montheillet, *et al.*, Thermec Berlin 2009, Materials Science Forum, **638–640**, 2010, 2543–2548.

D. Piot, G. Damamme, F. Montheillet, Thermec Québec 2011, Materials Science Forum, **706–709**, 2012, 234–239.

G. Smagghe, D. Piot, F. Montheillet *et al.*, Thermec Graz 2016, Materials Science Forum, **879**, 2017, 1794–1799.