

# Modélisation en champ complet des phénomènes de recristallisation et de croissance de grains par une approche level-set : un outil de simulation avancée adapté à un usage industriel

Marc Bernacki<sup>1</sup>, Benjamin Scholtes<sup>1,2</sup>, Amico Settefrati<sup>2</sup>, Nathalie Bozzolo<sup>1</sup>, C. Moussa<sup>1</sup>, D. Pino Muñoz<sup>1</sup>, Y. Zhan<sup>1,3</sup>, Emmanuel Rigal<sup>3</sup>, Christian Dumont<sup>4</sup>, Remy Besnard<sup>5</sup>, Isabelle Poitraul<sup>6</sup>, Joëlle Demurger<sup>7</sup>, Aurore Montouchet<sup>8</sup>, Isabelle Bobin<sup>8</sup>, Jean-Michel Franchet<sup>9</sup>

<sup>1</sup>Mines ParisTech, PSL Research University, CEMEF, Sophia Antipolis, France

<sup>2</sup>Transvalor S.A., 694 avenue Maurice Donat, Mougins, France

<sup>3</sup>CEA Liten, Grenoble, France

<sup>4</sup>Aubert & Duval, Les Ancizes-Comps, France

<sup>5</sup>CEA Valduc, Is-Sur-Tille, France

<sup>6</sup>Industeel, ArcelorMittal, Le Creusot, France

<sup>7</sup>Ascometal, CREAS, Hagondange, France

<sup>8</sup>Areva Creusot Forge, Le Creusot, France

<sup>9</sup>Safran, SafranTech, Magny-Les-Hameaux, France

## Introduction

La simulation thermomécanique de la mise en forme des matériaux métalliques est prédictive, d'un point de vue macroscopique, si la dépendance de la contrainte d'écoulement vis-à-vis de la déformation, de la vitesse de déformation, et de la température est décrite par une loi de comportement adaptée. Les propriétés mécaniques et le comportement rhéologique des matériaux métalliques dépendent fortement de la densité de dislocations et des structures constituées au sein du réseau de dislocations. Il apparaît donc naturel d'incorporer ces aspects métallurgiques dans les outils de simulation numérique afin de décrire les principaux mécanismes physiques à l'œuvre dans le matériau déformé : écrouissage, restauration, migration des joints de grains, germination et croissance de grains recristallisés, que ce soit en conditions statiques (au cours du chauffage ou traitement thermique), dynamiques (pendant une déformation à chaud) ou post-dynamiques. Cette étape est nécessaire au développement de modèles avec un fondement physique qui soient capables de prédire l'évolution du matériau lui-même, ou plus exactement de sa microstructure. Des modèles macroscopiques et homogénéisés sont assez fréquemment utilisés dans l'industrie, notamment parce qu'ils ne nécessitent pas de moyens de calculs particuliers, qu'ils sont assez simples et rapides à mettre en œuvre [1, 2]. Ces avantages doivent néanmoins être nuancés par le fait que ces modèles nécessitent de réaliser au préalable un grand nombre de mesures expérimentales impliquant des moyens d'analyse parfois assez lourds, afin d'identifier les valeurs de paramètres adaptés à chaque cas (matériau/procédé). De plus, le principe même de l'homogénéisation peut empêcher de décrire les phénomènes métallurgiques locaux apparaissant de manière hétérogène dans la microstructure.

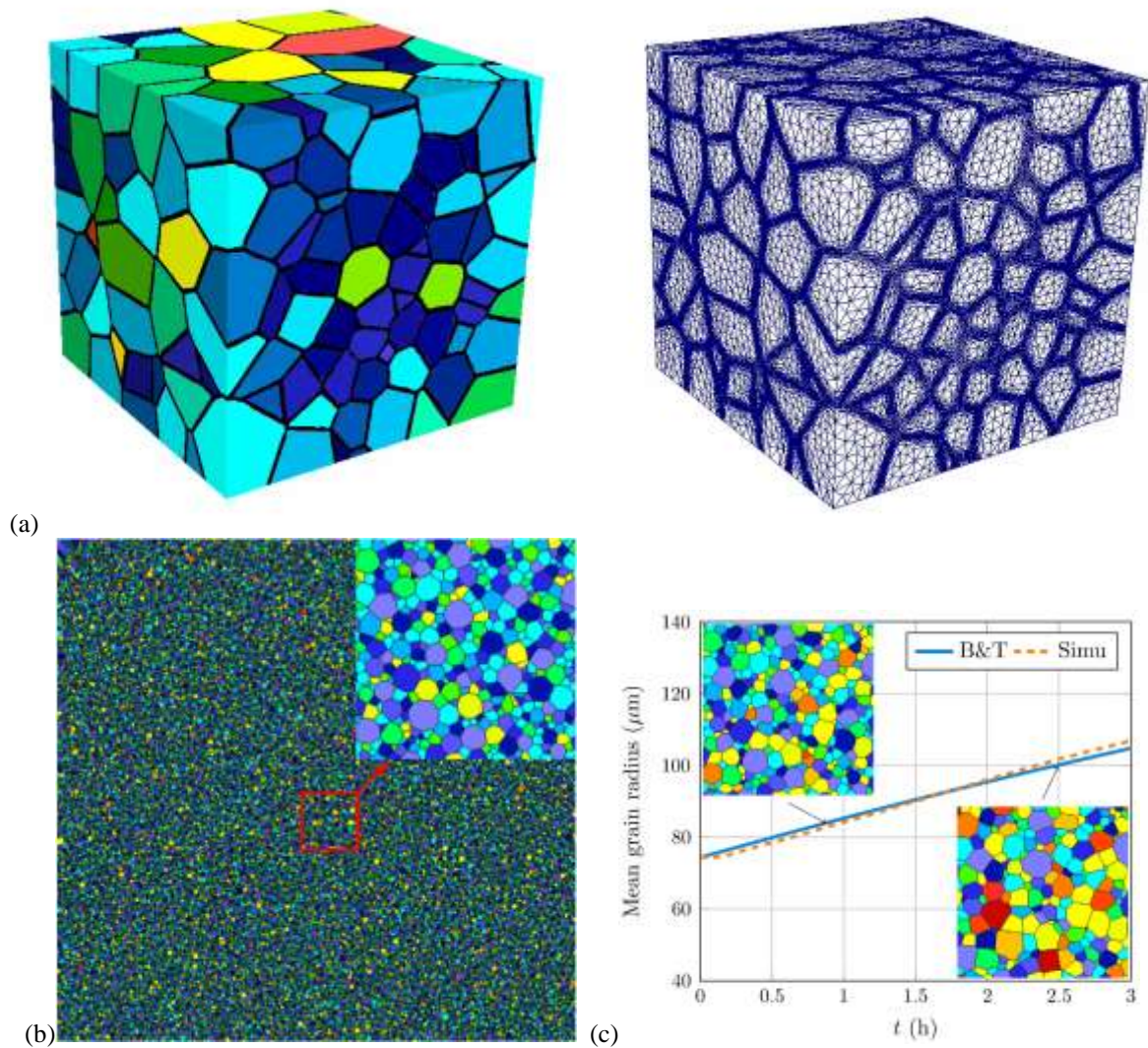
Depuis une quinzaine d'années, des modèles à plus fine échelle, appelés modèles en champ complet, ont été développés pour décrire explicitement la microstructure et simuler son évolution [3-5] à l'échelle du polycristal. L'idée sous-jacente est que le réseau de joints de grains, sa morphologie et sa topologie jouent un rôle primordial dans l'évolution de la microstructure, il faut donc le prendre en compte de manière aussi fine que possible. Une nouvelle approche en champ complet, basée sur la description des interfaces au moyen de fonctions distance (level-set) dans un contexte éléments-finis (EF), a été introduite pour modéliser la recristallisation statique (incluant le phénomène de germination) en deux puis trois dimensions, et a ensuite été étendue à la modélisation de la croissance de grains [6-8]. L'un des avantages de cette méthode est que le phénomène d'ancrage de joints de grains par des particules de seconde phase (« Smith-Zener pinning »), qui apparaît dans de nombreux alliages industriels, est pris en compte de manière naturelle, sans introduire d'hypothèse simplificatrice ou de paramètre spécifique [9]. L'inconvénient majeur des modèles en champ complet est qu'ils sont souvent très coûteux d'un point de vue numérique, ce qui peut même devenir rédhibitoire pour certains calculs en trois dimensions. Par ailleurs, ils reposent sur de nombreux paramètres dont la

calibration peut être assez complexe. Des avancées majeures ont été réalisées tout récemment pour réduire ces inconvénients [10-12] et rendre leur usage possible en milieu industriel.

## Description du modèle numérique

Les simulations sont réalisées à l'échelle mésoscopique, sur un Volume Élémentaire Représentatif (VER) au sein duquel les éléments constitutifs de la microstructure sont représentés explicitement. Le polycristal est construit de manière exacte ou statistique en respectant les caractéristiques topologiques des grains et les propriétés métallurgiques (distribution d'orientations, champ de densité de dislocations...) au moyen d'algorithmes performants [13,8]. Lors de la simulation d'un phénomène métallurgique donné, la microstructure évolue par le déplacement des interfaces (joints de grains par exemple). Le modèle décrit ici repose sur des fonctions level-set pour la description des interfaces dans un environnement EF. La fonction level-set utilisée est généralement une fonction distance positive à l'intérieur du grain et négative à l'extérieur, dont la valeur est égale à la distance au joint de grain le plus proche. Les joints de grains sont ainsi décrits par les iso-valeur zéro de ces fonctions. Cette approche, de type « front-capturing » présente l'intérêt d'éviter le suivi de contour par des techniques de discrétisation des joints de grains tout en gérant de manière naturelle les évolutions topologiques (apparition ou disparition des grains) durant la migration des joints de grains. Théoriquement, chaque grain doit être représenté par une fonction level-set, mais il est en fait possible de décrire plusieurs grains avec une seule fonction, à condition que ces grains ne soient pas voisins. En pratique, une fonction level-set (dite globale) est définie pour un ensemble de grains séparés d'au moins  $n$  grains les uns des autres. Cette méthode, dite de coloration, permet de travailler avec un nombre de fonctions level-set globales  $N_p$  nettement inférieur au nombre de grains  $N_g$ , et ainsi de réduire considérablement les temps de calcul. Le nombre  $n$  doit être choisi suffisamment petit pour optimiser le temps de calcul, mais suffisamment grand pour éviter la coalescence numérique des grains appartenant à une même fonction level-set globale au cours du calcul. Un algorithme de recoloration des grains a été développé pour éviter ce phénomène indésirable [11,12]. Le modèle fait évoluer le réseau de joints de grains en résolvant un ensemble d'équations de convection-diffusion [7] et en appliquant une procédure de réinitialisation permettant de conserver les propriétés métriques des fonctions level-set globale. Le développement récent d'un algorithme de calcul parallèle particulièrement efficace, basé sur une approche directe [10], a permis de gagner de manière significative en temps de calcul par rapport à la méthode de réinitialisation classique employée antérieurement [7-9] qui reposait sur une équation d'Hamilton-Jacobi associée à chaque fonction level-set globale.

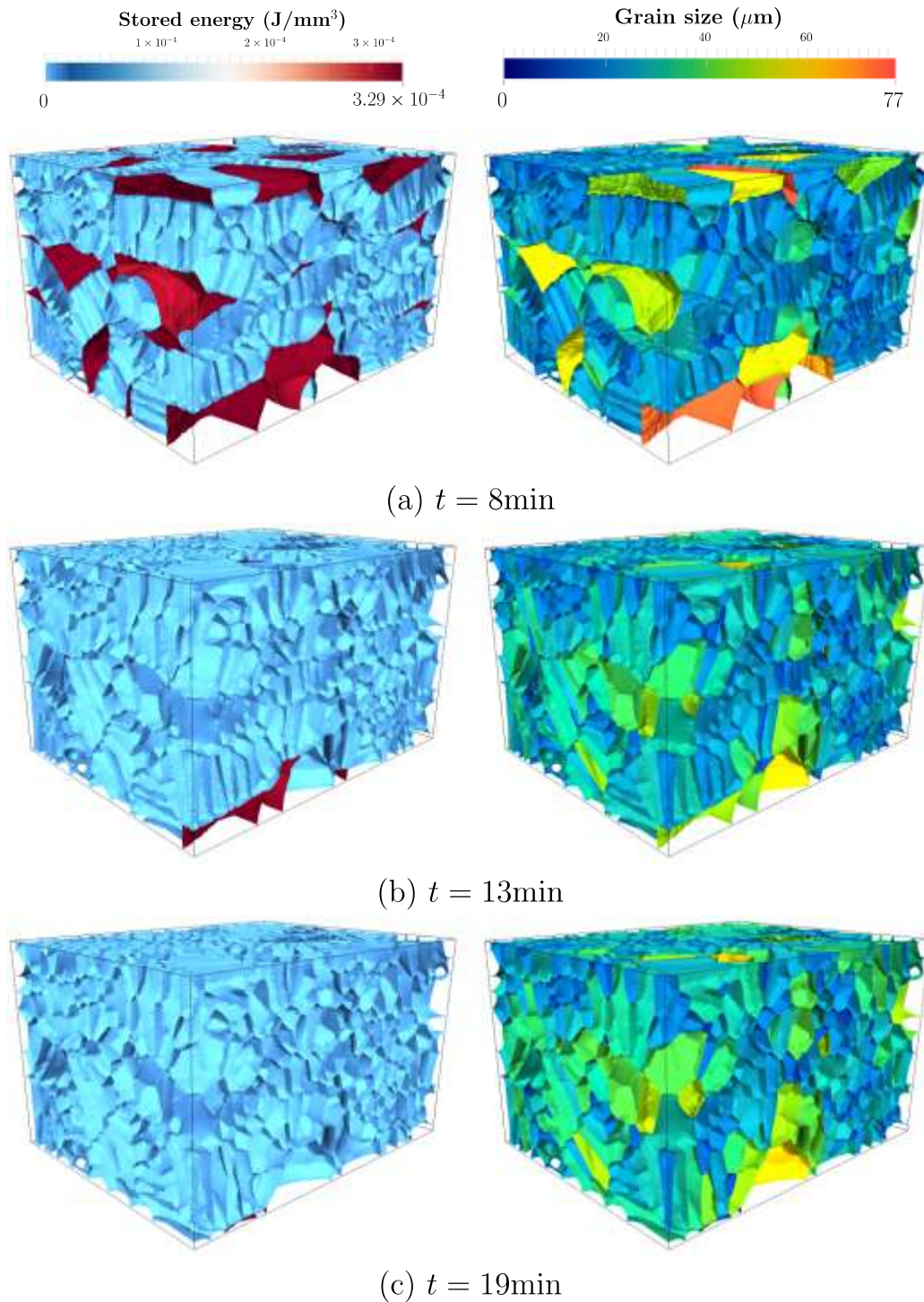
Comme illustré en figure 1, le modèle fonctionne en 3D comme en 2D. Les résultats de simulation numériques sont d'autant plus réalistes et prédictifs que la description des interfaces est précise. En 2D, il est possible d'utiliser un maillage adaptatif anisotrope afin de parfaire cette description tout en améliorant les temps de calcul. Au cours du calcul, le maillage est réadapté périodiquement de sorte que la zone raffinée suive les interfaces en mouvement. Cette méthode permet de gagner à la fois en précision et en temps de calcul. Pour les calculs en 3D, la même méthode de remaillage peut en principe être appliquée (figure 1a), mais elle reste à améliorer pour en diminuer le coût numérique. Les conditions aux limites appliquées au volume élémentaire représentatif considéré traduisent les conditions thermomécaniques locales vues par le matériau à l'échelle macroscopique.



**Figure 1.** (a) Représentation 3D d'un polycristal et maillage éléments finis correspondant (maillage anisotrope aux abords des joints de grains), (b) représentation 2D d'un polycristal d'acier 304L (incluant 50000 grains) et (c) évolution de la microstructure décrite en (b) au cours d'un maintien isotherme à 1050°C calculée par l'approche level-set décrite dans cet article, comparée avec le résultat du modèle classique de Burke et Turnbull [11, 14].

### Simulations représentatives en 3D

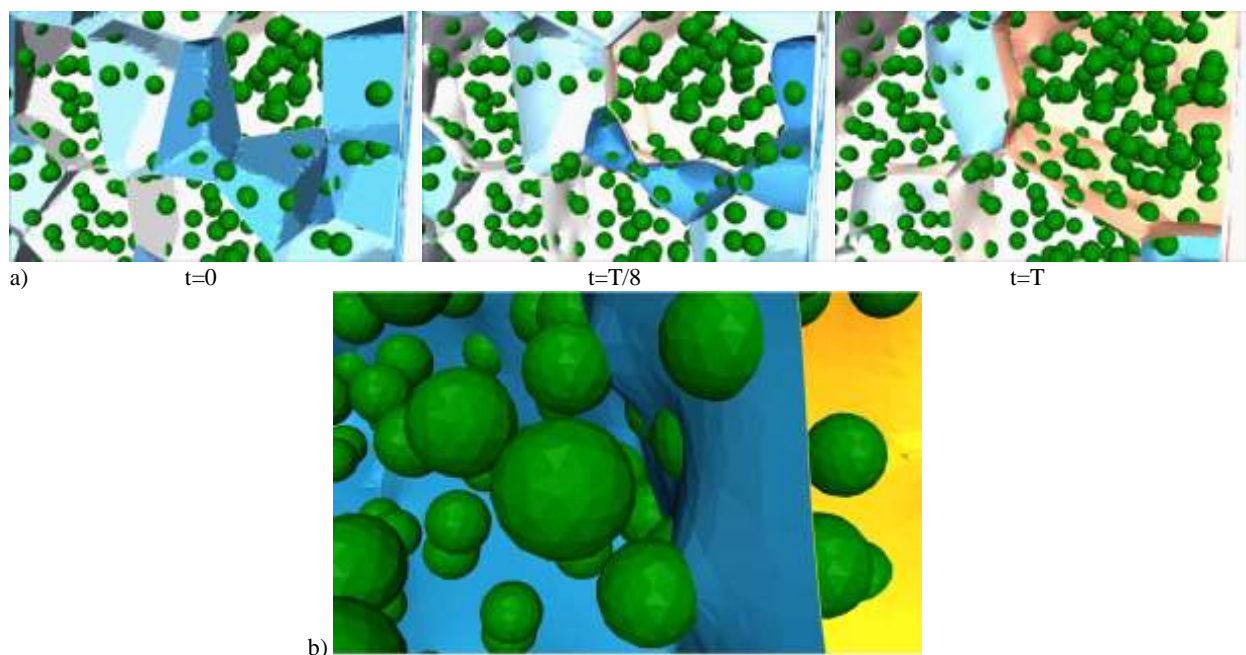
La figure 2 illustre un cas de recristallisation statique de l'acier austénitique 304L au cours d'un traitement thermique à 1050°C après déformation. L'évolution de la microstructure est alors pilotée à la fois par la consommation de l'énergie stockée dans le matériau au cours de la déformation plastique préalable, et par la réduction de la contribution interfaciale à l'enthalpie libre du système.



**Figure 2.** Evolution de la microstructure de l'acier 304L par recristallisation statique à 1050°C [12]. Le code de couleur traduit le niveau d'énergie stockée pour la colonne de gauche et la taille de grains pour la colonne de droite.

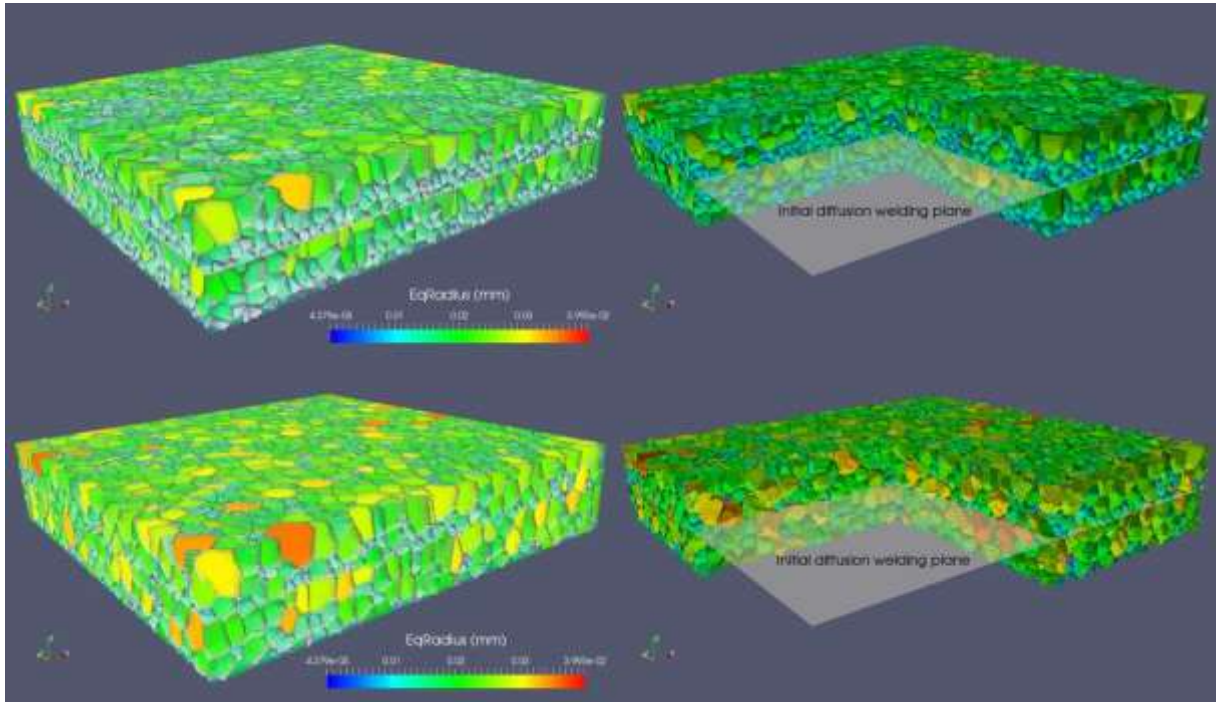
Pour beaucoup de matériaux industriels, notamment des matériaux de structure, une taille de grains fine est nécessaire afin de satisfaire le cahier des charges des propriétés mécaniques. Ainsi beaucoup de ces alliages comportent des particules de seconde phase qui visent à bloquer, ou du moins gêner, le mouvement des joints de grains, freinant ainsi la croissance des grains. Cette méthode est généralement efficace si la migration des joints de grains est pilotée uniquement par les forces de capillarité (régime de croissance de grains). En présence d'énergie stockée (matériaux ayant subi une déformation plastique), il peut apparaître au cours de traitements thermiques un phénomène de croissance sélective, ne concernant que quelques grains spécifiques alors que les autres grains de la microstructure restent stables. Ce phénomène mène ainsi à une distribution de tailles de grains bimodale indésirable [15]. Les grains qui se développent sont caractérisés par une énergie stockée plus faible que

la matrice de grains fins environnante ; leurs joints sont ainsi soumis à une force motrice qui peut facilement dépasser la force de freinage exercée par les particules de seconde phase, et le grain peut continuer de se développer malgré la présence de ces particules. Les modèles en champ moyen ne sont pas adaptés à la description de tels phénomènes locaux, ces modèles reposant par principe sur l'homogénéisation des grandeurs microstructurales. Pour traiter de tels cas, le recours à des modèles 3D en champ complet, représentant explicitement la microstructure et ses fluctuations topologiques, devient nécessaire. La possibilité de rendre compte des phénomènes d'ancrage des joints de grains par des particules de seconde phase dans des simulations par la méthode level-set a d'abord été démontrée par des calculs en 2D [9]. Ce travail a été repris et amélioré récemment en appliquant les développements numériques décrits ci-dessus [10-12] pour réaliser des simulations en 3D [16,17] dont les résultats sont illustrés sur la figure 3. Ces nouveaux calculs ont en outre permis de rediscuter l'équation de taille de grain limite de Smith-Zener [17]. Dans ce contexte, les particules de seconde phase (en vert sur la figure 3) sont en fait simplement décrites comme des vides dans le maillage élément finis. De cette manière, les interfaces particule/grain peuvent être traitées comme des interfaces cohérentes (faible énergie) ou incohérentes (énergie similaire à celle des joints de grains), en appliquant des conditions aux limites adaptées. L'interaction entre les particules et les joints de grains est ainsi naturellement reproduite par la modification de la courbure locale du joint entrant en contact avec la particule (comme illustré par la figure 3b).



**Figure 3.** (a, de gauche à droite) Simulation en 3D de la croissance de grains dans l'Inconel™ 718, contenant des particules de seconde phase (sphères vertes); (b) zoom en  $t=T$  sur l'interaction entre un joint de grains (surface bleue) et quelques particules de seconde phase.

Enfin, la figure 4 illustre l'application de ces nouveaux outils numériques pour simuler l'évolution de la microstructure de l'acier austénitique 316L durant les dernières étapes d'un procédé de type soudage diffusion [18]. Ce procédé permet l'assemblage de tôles pour la fabrication d'échangeurs thermiques compacts. Mettre au point un tel procédé nécessite de bien maîtriser les évolutions de microstructure afin d'assurer une soudure optimale, une distribution de taille de grains contrôlée tout en minimisant la déformation des canaux. Dans les premiers instants, la déformation plastique permet de réduire les aspérités des surfaces en contact. Après fluage, les porosités interfaciales résiduelles sont ensuite refermées par des mécanismes diffusionnels. L'opération de soudage se termine par le processus de croissance de grains qui fait définitivement disparaître l'interface initiale entre les deux tôles assemblées. Le réglage fin des paramètres du procédé consiste justement à faire disparaître cette interface tout en contrôlant la distribution de tailles de grains résultante. La modélisation à l'échelle mésoscopique apparaît là aussi comme un outil parfaitement adapté pour guider l'optimisation du procédé. La figure 4 illustre le résultat de la simulation de cette dernière étape de croissance de grains dans le cas de tôles de 316L.



**Figure 4.** Simulation en 3D (par la méthode level-set) de l'ultime étape d'un procédé de soudage par diffusion (croissance de grains) appliqué pour l'assemblage de tôles d'acier 316L. Le code de couleur est relatif à la taille de grains ; sur les figures de gauche le réseau de joints de grains apparaît en blanc ; sur les figures de droite une coupe permet de visualiser la position le plan d'assemblage des deux tôles initiales. Le système initial est constitué de plus de 20000 grains. Figures du haut : état du système dans les premiers instants de la croissance de grains (les jonctions en T des joints de grains sont encore visibles au niveau du plan d'assemblage). Figures du bas : état du système après croissance de grains pendant 600s à 1100°C.

## Conclusion

Une approche en champ complet s'appuyant sur la méthode level-set dans un contexte éléments finis a été développée pour simuler les évolutions de microstructure que connaissent les matériaux polycristallins sous sollicitation thermique ou thermomécanique. La modélisation à cette échelle mésoscopique est un nouvel outil qui peut permettre de mieux comprendre certains phénomènes métallurgiques complexes, mais qui peut également permettre de calibrer ou d'améliorer les modèles existants aux échelles supérieures (tels que les modèles en champ moyen) [17,19]. Les simulations en champ complet décrivent le matériau et ses caractéristiques microstructurales de manière réaliste. Les progrès récemment réalisés sur le plan des méthodes numériques sous-jacentes permettent de traiter des cas d'application industriels concrets et même d'envisager leur usage en milieu industriel dans un avenir proche. C'est dans cette optique que le projet de [Chaire ANR industrielle DIGIMU](#), qui fait partie des cinq projets sélectionnés par l'ANR dans le programme "Chaires Industrielles - Edition 2016" a été conçu.

L'objectif commun à tous les partenaires industriels qui soutiennent ces développements (figure 5) est d'assurer une qualité optimale de leurs produits tout en garantissant les délais de réalisation les plus courts possibles. Dans ce contexte, le recours à des outils de simulation numérique réalistes et performants apparaît de plus en plus incontournable. Les développements numériques décrits ici, ainsi que d'autres en cours et à venir dans la Chaire ANR industrielle DIGIMU seront intégrés au logiciel DIGIMU® dont la première version est disponible depuis début 2016.



Figure 5. Consortium industriel soutenant le développement du logiciel [DIGIMU®](#).

## References

1. P. Bernard, S. Bag, K. Huang, R.E. Logé, *Mat. Sci. Eng. A* **528** (2011) 7357-7367.
2. M. Mukherjee, U. Prahl, W. Bleck, *Steel Res. Int.* **81** (2010) 1102-1116.
3. A.D. Rollett, D. Raabe, *Comp. Mater. Sci.* **21** (2001) 69-78.
4. K. Piekos, J. Tarasiuk, K. Wierzbanski, B. Bacroix, *Recrystallization and Grain Growth III Proc. (Jeju Island, Korea)* (2007) 1157-1162.
5. L.Q. Chen, *Ann. Rev. Mater. Res.* **32** (2002) 113-140.
6. M. Bernacki, H. Resk, T. Coupez, R.E. Logé, *Mod. Sim. Mat. Sci. Eng.* **17** (2009).
7. M. Bernacki, R.E. Logé, T. Coupez, *Scr. Mat.* **64** (2011) 525-528.
8. A.L. Cruz-Fabiano, R. Logé, M. Bernacki, *Comp. Mat. Sci.* **92** (2014) 305-312.
9. A. Agnoli, N. Bozzolo, R.E. Logé, J.-M. Franchet, J. Laigo, M. Bernacki, *Comp. Mat. Sci.* **89** (2014) 233-241.
10. M. Shakoor, B. Scholtes, P.-O. Bouchard, M. Bernacki, *App. Math. Mod.* **39** (2015) 7291-7302.
11. B. Scholtes, M. Shakoor, A. Settefrati, P.-O. Bouchard, N. Bozzolo, M. Bernacki, *Comp. Mat. Sci.* **109** (2015) 388-398.
12. B. Scholtes, R. Boulais-Sinou, A. Settefrati, D. Pino Muñoz, I. Poitault, A. Montouchet, N. Bozzolo, and M. Bernacki, *Comp. Mat. Sci.*, **122** (2016) 57-71.
13. K. Hitti, P. Laure, T. Coupez, L. Silva, M. Bernacki, *Comp. Mat. Sci.*, **61** (2012) 224-238.
14. J.E. Burke, D. Turnbull, *Prog. in Met. Phys.*, **3** (1952) 220-292.
15. A. Agnoli, M. Bernacki, R. Logé, J.-M. Franchet, J. Laigo, and N. Bozzolo, *Metallurgical and Materials Transactions A*, **46** (2015) 4405-4421.
16. B. Scholtes, M. Shakoor, N. Bozzolo, P.-O. Bouchard, A. Settefrati, and M. Bernacki. *Advances in level-set modeling of recrystallization at the polycrystal scale - development of the digi- $\mu$  software.* *Key Eng. Mat.*, **651-653** (2015) 617-623.
17. B. Scholtes, D. Ilin, A. Settefrati, N. Bozzolo, A. Agnoli, and M. Bernacki, *Superalloys 2016: Proceedings of the 13th International Symposium on Superalloys*, (2016) 497-503.
18. E. Rigal, N. Bouquet, M. Bernacki, and F. Bernard. *Etablissement et évolution des interfaces lors du soudage diffusion.* *Journées annuelles de la SF2M, Matériaux et conversion d'énergie*, 2015.
19. L. Maire, B. Scholtes, M. Charbel, D. Pino Muñoz, N. Bozzolo, and M. Bernacki, *Improvement of 3-D mean field models for pure grain growth based on full field simulations*, *Journal of Materials Science*, (2016), In press.