

Modélisation et simulation numérique par méthode FFT de la localisation des contraintes internes et des densités de dislocations dans un acier composite nouvelle génération 'Fe-TiB₂'

J. Genée^{1,2}, S. Berbenni^{1,2}, N. Gey^{1,2}, J. Guyon^{1,2}, F. Bonnet³

¹ Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécaniques des Matériaux, Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers ParisTech, LEM3, 57000 Metz, France, {julien.genee,stephane.berbenni,nathalie.hey,julien.guyon}@univ-lorraine.fr

² Laboratory of Excellence on Design of Alloy Metals for low mAss Structures (DAMAS), Université de Lorraine, France

³ ArcelorMittal Research Department, Maizières-lès-Metz, France, frederic.bonnet@arcelormittal.fr

Résumé — Un modèle d'élasto-viscoplasticité cristalline (EVP), basé sur la méthode des transformées de Fourier rapide (FFT) et couplé à la mécanique des champs de dislocations (MFDM), est présenté et appliqué afin de décrire l'évolution en déformation des densités de Dislocations Géométriques Nécessaires (GND) dans un composite à matrice métallique Fe-TiB₂. Des volumes élémentaires réalistes basés sur la microstructure réelle sont considérés. Les résultats montrent la capacité de l'approche à prédire les gradients des champs mécaniques proches des interfaces matrice/renforts.

Mots clefs — FFT, densités de dislocations, localisation de la déformation, microstructure 3D réaliste.

1. Contexte industriel et scientifique

Dans le contexte de l'allègement des structures automobiles, ArcelorMittal Research développe des alternatives aux aciers conventionnels (2^{ème} et 3^{ème} génération : dual phase, TRIP, etc.) pour la conception des pièces dimensionnées en rigidité. La densité et la rigidité de l'acier sont améliorées par effet composite en renforçant la matrice en acier ferritique avec des particules en céramique de type TiB₂ (de structure cristalline hexagonale et possédant un module de Young élevé $E = 565$ GPa et une faible densité $\rho = 4,5$ g.cm⁻³) [1]. Pour une fraction volumique de 10% de TiB₂, le gain en rigidité spécifique peut ainsi atteindre 15% par rapport à un acier classique [2]. Les renforts TiB₂ peuvent être obtenus par précipitation in-situ à partir d'une mère de coulée Fe-Ti-B et le composite peut ainsi être élaboré par des procédés de coulée continue, laminage à chaud et à froid qui garantissent un faible coût industriel et une plus grande productivité.

Cependant, le fort contraste de propriétés mécaniques entre la matrice et les renforts induit des concentrations de contraintes locales qui, lors de la mise en service, peuvent favoriser l'apparition d'un endommagement sous la forme de fracturation des particules ou de formation de fissures/décohésions au niveau des interfaces matrice/renforts [3-5]. L'application industrielle du composite Fe-TiB₂ pourrait ainsi être limitée par une baisse significative du module effectif, de la ténacité et de la ductilité, due à une rupture prématurée des renforts céramiques.

Par conséquent, il est indispensable de comprendre les mécanismes de déformation du composite et d'évaluer la répartition très hétérogène des contraintes entre la matrice ductile et les renforts rigides. La microstructure complexe des renforts (forte disparité de taille et morphologies des particules de TiB₂, distribution et fraction volumique des particules dans la matrice) s'ajoute à la complexité d'appréhender la répartition des contraintes internes et des champs de déformation dans la matrice ferritique, exerçant ainsi une forte influence sur l'apparition et la propagation de l'endommagement.

La présente étude vise à prédire, par le biais de la simulation numérique, la répartition des contraintes internes induites par la déformation. Une extension d'un modèle élasto-viscoplastique de plasticité cristalline basée sur la méthode FFT et permettant de prendre en compte la mécanique des champs de dislocations à l'échelle mésoscopique (MFDM-EVP-FFT) [6] est appliquée pour prédire,

avec la déformation, les évolutions des densités de Dislocations Géométriquement Nécessaires (GND) mesurables expérimentalement par la technique EBSD. La description de la méthode et les résultats de son application sont détaillés respectivement en sections 2 et 3.

2. Approche MFDM-EVP-FFT : théorie et méthode spectrale numérique

2.1. Équations des champs (MFDM)

L'ensemble des équations constitutives suivantes du modèle FFT (équation 1) est résolu en petites déformations afin d'évaluer les champs de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ et de déplacement \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} &= 0 \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{C} : (\mathbf{U}^e)^{sym} \\ \mathbf{U} &= \operatorname{grad} \mathbf{u} = \mathbf{U}^e + \mathbf{U}^p \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= \bar{\mathbf{T}} \text{ sur } S_t \\ \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} \text{ sur } S_u \end{aligned} \quad (1)$$

où \mathbf{C} est le tenseur de 4^{ème} ordre des rigidités élastiques. Le tenseur de distorsion totale \mathbf{U} regroupe la distorsion plastique \mathbf{U}^p provenant du mouvement des dislocations et la distorsion élastique \mathbf{U}^e du réseau cristallin qui sont deux champs incompatibles. À l'échelle mésoscopique, deux ensembles de dislocations sont considérés : les Dislocations Statistiquement Stockées (SSD) qui ne contribuent qu'à la plasticité globale et les Dislocations Géométriquement Nécessaires ou polaires (GND) qui contribuent également à l'établissement des contraintes internes. Une version réduite de la MFDM est considérée [8,9] dans laquelle les variables de champs sont interprétées comme des quantités moyennes. Dans ce contexte, le taux de distorsion plastique (équation 2) s'écrit :

$$\dot{\mathbf{U}}^p = \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v} + \mathbf{L}^p \quad (2)$$

Le taux de distorsion plastique \mathbf{L}^p associé au glissement des SSD est donné par :

$$\mathbf{L}^p = \sum_{s=1}^N \dot{\gamma}^s \mathbf{b}^s \otimes \mathbf{n}^s \text{ avec } \dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}^0 \left(\frac{|\tau^s|}{\tau_c} \right)^{1/m} \operatorname{sign}(\tau^s) \quad (3)$$

où \mathbf{b}^s et \mathbf{n}^s correspondent respectivement aux directions de glissement et normales unitaires aux plans de glissement pour chaque système de glissement s . La loi d'évolution du taux de glissement $\dot{\gamma}^s$ est une loi puissance où m est un paramètre de sensibilité à la vitesse de déformation, τ^s est la contrainte de cission résolue, $\dot{\gamma}^0$ est le taux de glissement de référence et τ_c est la cission de référence dépendant de l'état d'écroutissage du matériau. Le taux de glissement accumulé sur l'ensemble des N systèmes de glissement est alors :

$$\dot{\Gamma} = |\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}| + \sum_{s=1}^N |\dot{\gamma}^s| \quad (4)$$

La loi d'écroutissage (équation 5) suit les hypothèses détaillées dans [6,10].

$$\dot{\tau}_c = \theta_0 \frac{\tau_s - \tau_c}{\tau_s - \tau_0} \dot{\Gamma} + k_0 \frac{\eta^2 \mu^2 b}{2(\tau_s - \tau_0)} \left(\sum_{s=1}^N |\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n}^s| |\dot{\gamma}^s| + \sum_{s=1}^N |\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n}^s| |\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}| \right) \quad (5)$$

où τ_0 est la contrainte critique due à la friction du réseau cristallin, τ_s est la contrainte de saturation, θ_0 est le taux d'écroutissage initial, η et μ sont des constantes matériau, b est l'amplitude du vecteur de Burgers, et k_0 est un paramètre associé au libre parcours moyen géométrique dû aux forêts de GND.

L'évolution temporelle du tenseur de densités de dislocations α est donné dans l'équation 6.

$$\dot{\alpha} = -\text{rot}(\dot{\mathbf{U}}^p) \quad (6)$$

Des considérations thermodynamiques [8] conduisent à définir le vecteur vitesse des dislocations \mathbf{v} suivant la direction de la force de glissement et l'équation adoptée pour décrire son amplitude v est basée sur une loi d'Orowan pour les GND mobiles (équation 7) :

$$v = \frac{\eta^2 b}{N} \left(\frac{\mu}{\tau_c} \right)^2 \sum_{s=1}^N |\dot{\gamma}^s| \geq 0 \quad (7)$$

2.2. Implémentation numérique

La transformée de Fourier de l'équation de type Lippmann-Schwinger avec champs incompatibles s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) &= -\hat{\boldsymbol{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \hat{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) \quad \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{0}) &= \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

Le symbole « $\hat{}$ » représente le passage dans l'espace de Fourier, $\boldsymbol{\Gamma}^0$ représente le tenseur de Green modifié associé au milieu élastique homogène \mathbf{C}^0 et $\tau_{ij} = \sigma_{ij} - C_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl}$ est le champ de polarisation de la contrainte. Les équations de champs continus obtenues dans l'espace de Fourier sont résolues par transformées de Fourier discrètes calculées par FFT. Le calcul de l'opérateur de Green modifié dans l'équation 8 est réalisé en utilisant une approximation par différences finies centrées sur une grille pivotée (introduite dans [11]).

Un schéma itératif de type augmenté Lagrangien est utilisé pour résoudre l'équation 8 en lien avec les équations de la MFD (section 2.1), cf. [6,7] pour les détails de la méthode. Les champs de contrainte et de déformation à une itération (n) donnée sont respectivement approximés par les champs auxiliaires $\lambda_{ij}^{(n)}$ et $e_{kl}^{(n)}$. Le tenseur de polarisation des contraintes s'exprime alors :

$$\tau_{ij}^{(n)} = \lambda_{ij}^{(n)} - C_{ijkl}^0 e_{kl}^{(n)} \quad (9)$$

Le schéma Lagrangien augmenté nécessite la minimisation du résidu \mathbf{R} (équation 10). Cette équation non-linéaire est résolue par un schéma de type Newton-Raphson.

$$R_{ij}(\boldsymbol{\sigma}^{(n+1)}) = \sigma_{ij}^{(n+1)} + C_{ijmn}^0 \varepsilon_{mn}^{(n+1)}(\boldsymbol{\sigma}^{(n+1)}) - \lambda_{ij}^{(n)} - C_{ijmn}^0 e_{mn}^{(n+1)} \quad (10)$$

Une fois la convergence atteinte pour les champs $\boldsymbol{\sigma}^{(n+1)}$ et $\boldsymbol{\varepsilon}^{(n+1)}$, la nouvelle valeur du champ de contrainte auxiliaire $\boldsymbol{\lambda}$ est calculée en utilisant l'algorithme de descente d'Uzawa :

$$\lambda_{ij}^{(n+1)} = \lambda_{ij}^{(n)} + C_{ijkl}^0 (e_{kl}^{(n+1)} - \varepsilon_{kl}^{(n+1)}) \quad (11)$$

L'algorithme est stoppé lorsque les différences entre les valeurs moyennes normalisées des champs de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ et $\boldsymbol{\lambda}$, et des champs de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ et \mathbf{e} sont inférieures à une précision de 10^{-5} . Ce critère de convergence implique la réalisation de l'équilibre des contraintes et le respect de la condition de compatibilité de la déformation.

L'équation de transport des densités de dislocations (équation 6) est de nature hyperbolique. Pour éviter le développement de fortes oscillations (dues au phénomène de Gibbs), celle-ci est résolue par une approche spectrale récente utilisant un filtre passe-bas de type exponentiel [12]. Le filtre spectral

donné par l'équation 13 est appliqué uniquement au premier membre de l'équation 12. Pour le second terme, les différences finies centrées couplées à la transformée de Fourier discrète sont utilisées.

$$\hat{\alpha}_{ij}^{t+\Delta t} = \kappa(\eta) \left(\hat{\alpha}_{ij}^t - \Delta t i \xi_k \left((\widehat{\alpha_{lj} v_k})^t - (\widehat{\alpha_{ik} v_j})^t \right) \right) - \Delta t i \xi_k e_{jkl} (\widehat{L_{il}^p})^t \quad (12)$$

$$\kappa(\eta) = \exp(-\beta(\eta)^{2p}) \quad (13)$$

où β et $2p$ correspondent respectivement au paramètre d'amortissement des hautes fréquences et à l'ordre du filtre exponentiel. Le pas de temps Δt est fixé selon une condition de Courant-Friedrichs-Levy (équation 14) afin de garantir la stabilité de la solution de l'équation de transport.

$$\Delta t_{CFL} = c \frac{\delta}{v_{max}} \quad (14)$$

où Δt_{CFL} est le pas de temps obtenu par la condition de Courant, δ est la taille de voxel, c est pris égal à 0.25 et v_{max} est la vitesse maximale des GND.

3. Application : simulation des distributions des densités de GND dans le matériau biphasé Fe-TiB₂

3.1. Méthodologie d'acquisition des microstructures pour la simulation par FFT

Une caractérisation tri-dimensionnelle de la microstructure a été réalisée par microscopie à double faisceaux (MEB-FEG-FIB [13]) et prise en compte pour générer une microstructure de synthèse réaliste, donnée d'entrée de la modélisation. La procédure de reconstruction de la microstructure est détaillée en Figure 1.

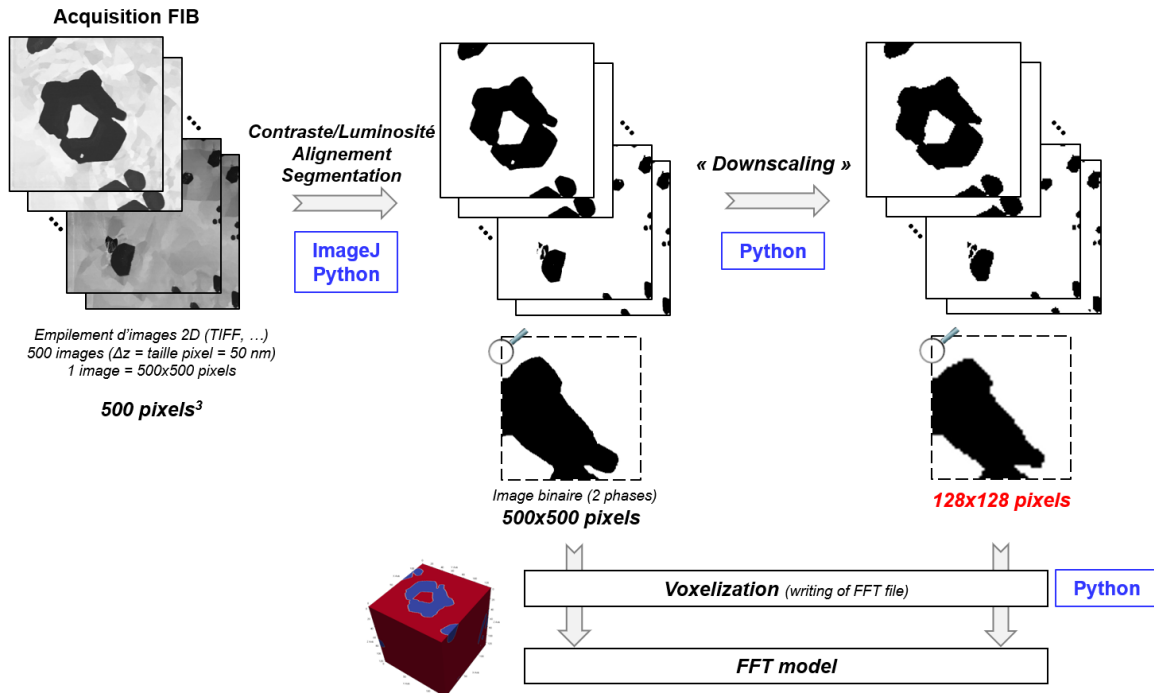


Figure 1 – Chaîne de construction d'une microstructure de synthèse pour la simulation par FFT à partir de l'empilement d'images électroniques obtenues par MEB-FEG-FIB (caractérisant la microstructure tri-dimensionnelle réelle du composite).

Différents traitements sont réalisés sur le logiciel de traitement d'images ImageJ afin : (i) d'aligner les images 2D constituant l'empilement 3D issu de l'acquisition au FEG-FIB, (ii) d'optimiser leur dynamique, puis (iii) de réaliser la segmentation des particules au sein de la matrice. La résolution des images 2D binaires obtenues après segmentation est ensuite réduite via un script de programmation Python (« downscaling ») afin d'obtenir une résolution qui soit adaptée pour le calcul par la méthode FFT. Les résultats associés au volume représenté en Figure 2 seront donnés dans la suite ; celui-ci correspond à une région de 20 μm d'arête et est obtenu après une réduction de la résolution des images d'origine ($\Delta x = 50 \text{ nm}$) à une taille adaptée pour le modèle (ici $128 \times 128 \times 128$ voxels). La fraction volumique des particules dans le volume de simulation est de 9,5%.

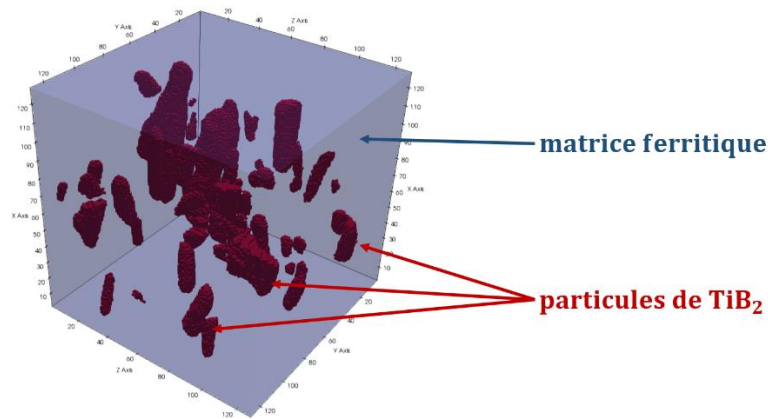


Figure 2 – Microstructure numérique ($128 \times 128 \times 128$ voxels) issue d'un empilement d'images obtenues par MEB-FEG-FIB. Seuls les voxels (rouges) correspondant aux particules TiB_2 sont ici représentés.

3.2. Données matériau et paramètres du modèle

La plasticité n'est considérée que pour la matrice ; les particules de TiB_2 sont supposées élastiques. Cette hypothèse est raisonnable au vu de la forte différence de rigidité entre la ferrite et les particules céramiques et au vu du faible niveau de déformation totale atteint pour les simulations (jusqu'à 0,5%). Les constantes élastiques du matériau (Fe- α et TiB_2 [14]) et les paramètres des différentes lois d'évolution de la plasticité (la loi d'évolution du taux de glissement, de la vitesse des GND : $\dot{\gamma}^0$, m et η ; et de l'écrouissage : θ_0 , τ_s , τ_0 et k_0) sont donnés dans les Tableaux 1 et 2. Ces paramètres sont arbitraires et non intrinsèques au matériau. Ceux-ci ont été choisis sans avoir recours à une procédure d'identification à partir de données expérimentales. L'amplitude du vecteur de Burgers pour la ferrite Fe- α est $b = 2.5 \times 10^{-10} \text{ m}$. Une seule orientation cristallographique est considérée pour la matrice plastique ; celle-ci est choisie de manière à maximiser le glissement sur les systèmes cubiques centrés de la ferrite. Le volume est soumis à une traction uniaxiale (dans la direction associée à la plus grande dimension des particules) avec des conditions aux limites mixtes en contraintes et en déformations et avec une vitesse de déformation imposée $\dot{E}_{33} = 0,001 \text{ s}^{-1}$. On ne considère aucune densité de dislocations initiale ($\alpha = \mathbf{0}$).

TiB ₂ (HCP)					Fe- α (BCC)	
C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{13} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)	E (GPa)	ν
654,5	56,5	98,4	454,5	263,2	211	0,33

Tableau 1 – Constantes élastiques du matériau utilisées pour les simulations [14].

$\dot{\gamma}^0$ (s^{-1})	m	η	b (m)	θ_0 (MPa)	τ_s (MPa)	τ_0 (MPa)	k_0
1	0,05	0,33	$2,5 \times 10^{-10}$	150	12	3	20

Tableau 2– Paramètres des lois d'évolution de la plasticité utilisés pour les simulations.

3.3. Résultats et discussion

La Figure 3 compare, en premier lieu, les réponses macroscopiques obtenues avec un modèle de plasticité cristalline classique (CP-EVP-FFT) et l'extension MFDM-EVP-FFT décrite dans la section 2. Cette dernière induit une augmentation significative du durcissement, s'expliquant par l'écroutissage non local important dû à la présence des forêts de GND.

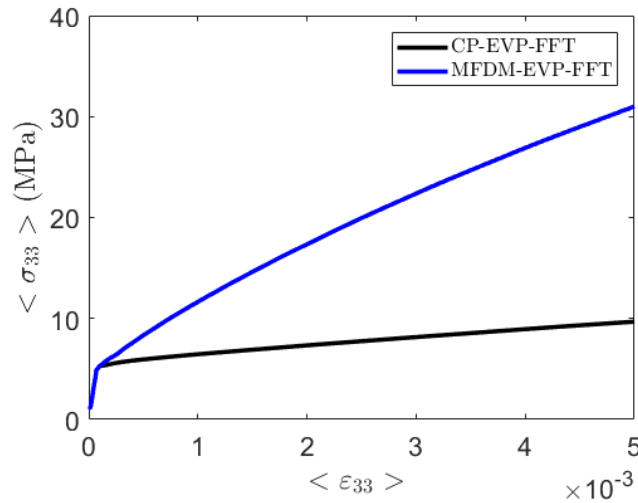


Figure 3 – Comparaisons des courbes macroscopiques $\langle \sigma_{33} \rangle$ vs. $\langle \varepsilon_{33} \rangle$ obtenues avec le modèle classique CP-EVP-FFT (noir) et le modèle étendu MFDM-EVP-FFT (bleu).

Les Figures 4 et 5 confrontent, pour une déformation totale en traction de 0.5%, les densités de dislocations simulées par le modèle CP-EVP-FFT et celles simulées par l'extension MFDM-EVP-FFT.

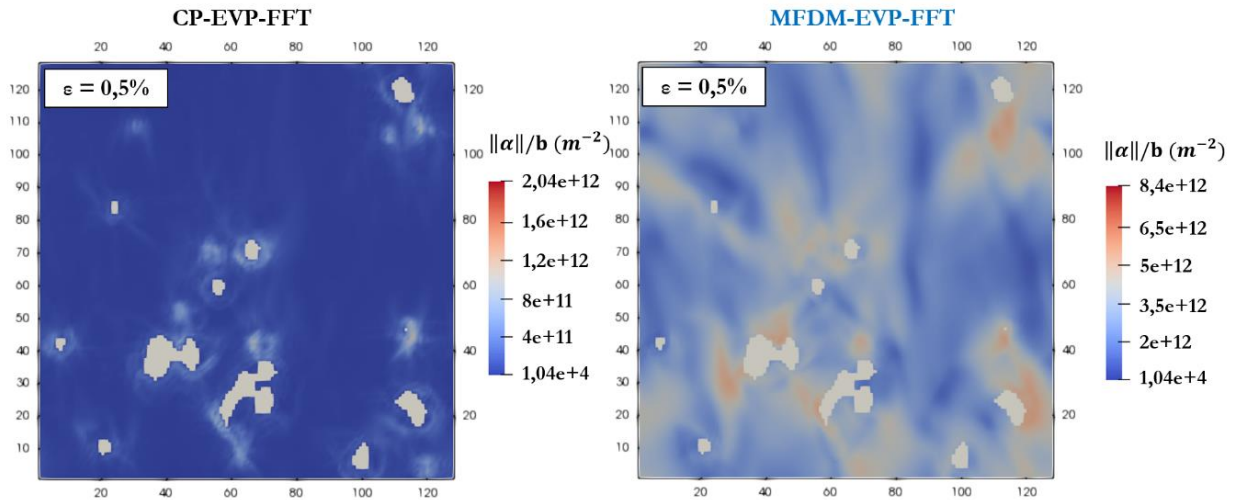


Figure 4 – Cartographies de la densité de GND (définie par $\rho_{GND} = \sqrt{\alpha_{ij}\alpha_{ij}}/b = \|\alpha\|/b$) pour une déformation totale en traction de 0.5%, calculée avec le modèle classique CP-EVP-FFT (gauche) et le modèle étendu MFDM-EVP-FFT (droite).

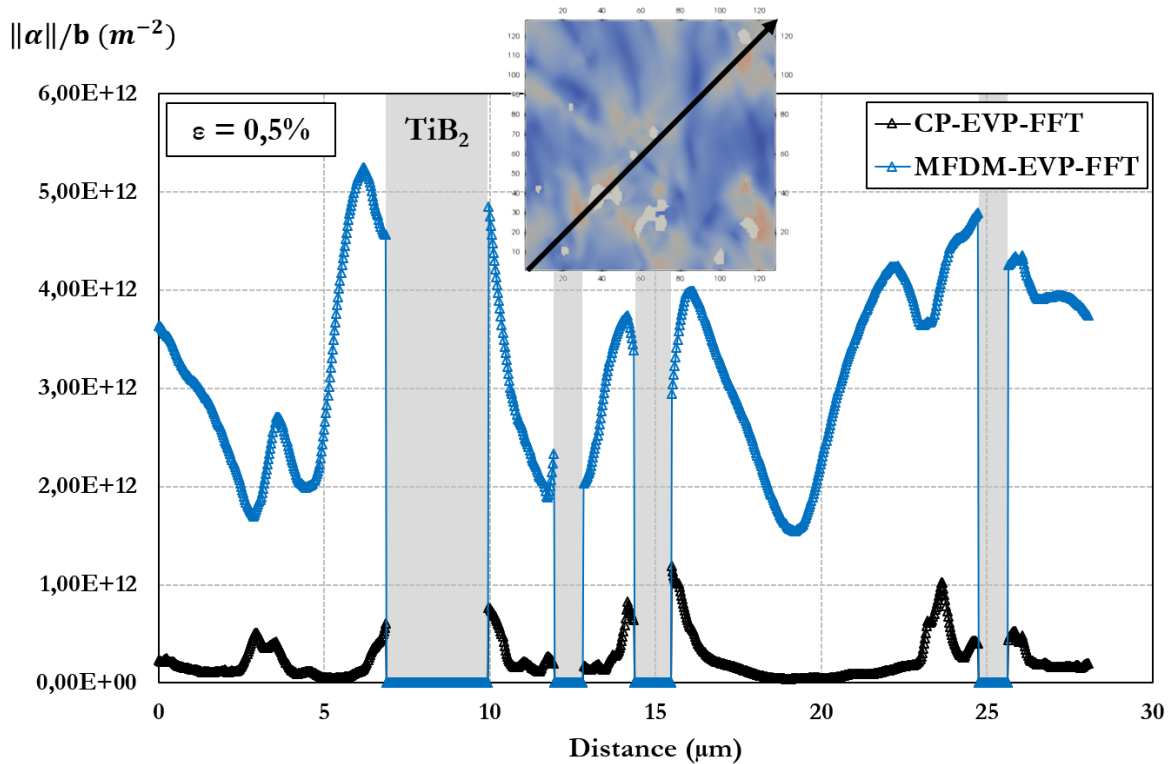


Figure 5 – Profils de la densité de GND (définie par $\rho_{GND} = \sqrt{\alpha_{ij}\alpha_{ij}}/b = \|\alpha\|/b$) pour une déformation totale en traction de 0.5%, calculée avec le modèle classique CP-EVP-FFT (noir) et le modèle étendu MFDM-EVP-FFT (bleu).

Un écart significatif sur le niveau de densité de GND au sein de la microstructure est observé avec le modèle étendu. En effet, les empilements continus de dislocations polarisées (GND), non décrits par le modèle CP classique qui ne décrit que des dislocations interfaciales, participent à l'établissement de gradients de densités de dislocations depuis les interfaces matrice/renforts et s'étendant dans la matrice environnante (Figures 4 et 5). Ces empilements de GND induisent également des gradients de contraintes dans la matrice à proximité des renforts, cependant moins marqués que les gradients de densités de GND, du fait du niveau de contraintes plus élevé dans les particules de TiB_2 . La forte disparité des niveaux de contraintes et densités de GND autour des particules dans l'ensemble du volume de simulation indique, quant à elle, une influence notable de la morphologie des particules de TiB_2 et de leur répartition dans la microstructure. Les effets de « clustering » et de géométrie des particules de TiB_2 doivent être étudiés sur des modélisations synthétiques permettant de piloter de manière découplée les effets de longueurs internes de la microstructure sur l'état des champs mécaniques internes.

4. Conclusions

L'étude proposée a permis l'application d'un modèle FFT, basé sur la mécanique des champs de dislocations à l'échelle mésoscopique (formulation MFDM-EVP-FFT [6]), à une structure biphasée formée d'une matrice ferritique et de particules TiB₂. Une méthodologie a été développée afin de construire des volumes voxellisés pour les simulations par FFT, tenant compte d'une description réaliste de la microstructure à partir d'un empilement 3D d'images acquises par microscopie à balayage double faisceaux MEB-FEG-FIB.

Les simulations numériques effectuées sur un volume représentatif de la microstructure réelle donnent des résultats satisfaisants quant à la description des hétérogénéités de déformation. La description des empilements de densités continues de GND aux interfaces matrice/particules permet de rendre compte de la répartition des densités de dislocations en déformation. Par ailleurs, une étude connexe a permis de montrer l'accord qualitatif de la simulation avec des mesures EBSD de densités de GND, menées sur des éprouvettes déformées. Des analyses paramétriques sont en cours de réalisation pour isoler les effets de longueurs internes. L'approche pourra aussi être complétée par la description polycristalline de la ferrite et la prise en compte des joints de grains et de phase en tant qu'interfaces impénétrables au glissement dû aux SSD et aux GND. La réalisation d'analyses EBSD 3D par MEB-FEG-FIB est en cours afin de prendre en compte dans la simulation une structure polycristalline de la matrice ferritique, avec une description plus réaliste de sa texture locale.

Remerciements

Ce travail est soutenu par l'Institut CARNOT ARTS (Arts et Métiers ParisTech) et s'inscrit dans le cadre d'une collaboration avec ArcelorMittal Research Department Maizières-Les-Metz, le PIMM et le LEM3. Les auteurs remercient K. Dorhmi, Z. Hamouche, K. Derrien, L. Morin, J-P. Chevalier pour des discussions fructueuses ainsi que la région Grand Est et le LabEx DAMAS (ANR-11-LABX-0008-01) pour leur soutien financier.

Références

- [1] ARCELOR Research group; Patent EP 1 897 963 A1, Bulletin 2008/11, (2008), 20.
- [2] F. Bonnet, V. Daeschler, G. Petitgand, *Can Metall. Q.* 53 (2014) 243–252.
- [3] Z. Hadjem-Hamouche, J.-P. Chevalier, Y. Cui, F. Bonnet, *Steel Res. Int.* 83 (2012) 538.
- [4] M. Dammak, M. Gaspérini, D. Barbier, *Mater. Sci. Eng.: A* 616 (2014) 123.
- [5] S. Lartigue-Korinek, M. Walls, N. Haneche, L. Cha, L. Mazerolles, F. Bonnet, *Acta Mater.* 98 (2015) 297–305.
- [6] K. S. Djaka, S. Berbenni, V. Taupin, R. A. Lebensohn, *Int. J. Sol. Struct.* (in press), 2019.
- [7] J. C. Michel, H. Moulinec, P. Suquet, *Int. J. Num. Meth. Eng.* 52 (2001) 139-160.
- [8] A. Acharya, A. Roy, *J. Mech. Phys. Sol.* 54 8 (2006), 1687-1743.
- [9] A. Roy, S. Puri, A. Acharya, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* 15 (2007) 167-180.
- [10] S. Puri, A. Das, A. Acharya, *J. Mech. Phys. Solids* 59 (2011) 2400-2417.
- [11] F. Willot, *C. R. Meca.* 343 (2015) 232-245.
- [12] K. S. Djaka, V. Taupin, S. Berbenni, C. Fressengeas, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 23 (2015) 065008.
- [13] J. Guyon, N. Gey, D. Goran, S. Chalal, F. Perez-Willard, *UltraMicroscopy* 161 (2016) 161-167.
- [14] N. L. Okamoto, M. Kusakari, K. Tanaka, H. Inui, S. Otani, *Acta Mater.* 58 (2010) 76-84.