

Vers un paradigme d'apprentissage de variété pour la caractérisation de l'anisotropie plastique dans des métaux et des alliages métalliques

Jianqiang Jin¹, Ludovic Cauvin², Balaji Raghavan³, Piotr Breitkopf⁴, Salima Bouvier⁵

¹Laboratoire Roberval, Université de Technologie de Compiègne, France, Jianqiang.Jin@utc.fr

²Laboratoire Roberval, Université de Technologie de Compiègne, France, Ludovic.Cauvin@utc.fr

³Laboratoire de Génie Civil et Génie Mécanique (LGCGM) EA 3913, INSA de Rennes, France, Balaji.Raghavan@insa-rennes.fr

⁴Laboratoire Roberval, Université de Technologie de Compiègne, France, Piotr.Breitkopf@utc.fr

⁵Laboratoire Roberval, Université de Technologie de Compiègne, France, Salima.Bouvier@utc.fr

Résumé — La modélisation du comportement plastique anisotrope des métaux est rendue difficile par l'influence de leur texture cristallographique et évolutive au cours de la déformation mécanique. Les approches généralement mises en œuvre ne prennent pas bien en compte les mécanismes physiques ou nécessitent l'identification de nombreux paramètres et génèrent des temps de calculs élevés. Nous présentons ici une approche d'apprentissage utilisant les données cristallographiques et la validons pour deux cas académiques, illustrant le potentiel de cette nouvelle méthode « sans modèle ».

Mots clefs — Variété de formes, apprentissage, plasticité, anisotropie, caractérisation.

1. Introduction et motivations

1.1. L'anisotropie plastique

L'anisotropie dans les métaux peut avoir diverses origines, par exemple, comme l'ont montrées les premières observations de Hill [1] pour des aciers doux recuits, de la formation de bandes de Luders, ce phénomène n'ayant pu être modélisé par le critère de Von Mises. Les métaux à structure cristallographique hexagonale compacte (HCP) présentent une anisotropie importante dans leurs propriétés mécaniques en raison de leurs textures initiales, des mécanismes de déformation, des niveaux de cisssions critiques suivant les différents systèmes de glissement activés (par exemple, basal ou pyramidal) ainsi que du sens des contraintes appliquées (par exemple, l'asymétrie de l'activation de maclage). Le zinc et ses alliages sont des métaux particuliers avec une structure cristallographique HCP avec un rapport c/a ($=1,856$) plus élevé que celui d'une structure idéale (c'est-à-dire $1,633$), raison pour laquelle ils ont relativement peu de systèmes de glissement et de maclage actifs.

En général, les matériaux HCP présentent plusieurs types de maclage. Cependant, pour les matériaux à base d'alliage de zinc, déformés à température constante, le maclage le long des plans $[1\ 0\ -1\ 2]$ est le mécanisme dominant qui permet des changements de forme inélastiques le long de l'axe c . Comme le rapport c/a des matériaux à base de zinc est supérieur à la valeur idéale, la direction du cisaillement due à l'activation du maclage est $[1\ 0\ -1\ -1]$ et le maclage se produit généralement sous compression parallèle à l'axe c .

Il n'y a que peu d'études consacrées à la caractérisation mécanique et à l'étude du comportement anisotrope du zinc et de ses alliages en fonction de la microstructure initiale, malgré leur utilisation industrielle très répandue. La littérature existante sur la modélisation mécanique de l'anisotropie des alliages de zinc est principalement basée sur des approches phénoménologiques [1,11]. L'approche phénoménologique considère l'anisotropie initiale à travers un « critère de plasticité » et des lois d'écrouissage. Les paramètres d'élasticité sont normalement identifiés à partir d'expériences, tandis que les paramètres d'écrouissage sont identifiés à l'aide de simulations par la méthode des éléments finis. Une autre approche de modélisation est l'approche micromécanique. Dans ce contexte, le modèle micromécanique auto-cohérent « Visco-Plastic Self-Consistent » (VPSC) développé par Lebensohn et

al. [12] qui n'impose ni l'équilibre des contraintes ni l'équilibre des déformations dans les grains individuels (contrairement aux modèles de Sachs et Taylor) est très adapté pour des matériaux HCP comme le Zinc et ses alliages. Il a notamment été utilisé pour étudier le comportement anisotrope de ce type de matériaux par Cauvin et al [2]. Toutefois, les modélisations micromécaniques nécessitent de bien identifier les lois de comportement locales du matériau, i.e. système de glissement et maclages mis en jeu ainsi que les lois d'écroissements associées.

1.2. Motivation pour l'utilisation d'une approche de « l'apprentissage par variété »

Les inconvénients des approches phénoménologiques et des approches micromécaniques (VPSC par exemple) sont, respectivement, de ne pas prendre en compte les mécanismes physiques, et d'être difficiles à identifier. Il existe un besoin réel de techniques de caractérisation anisotrope prenant compte la texture cristallographique en limitant les calculs haute-fidélité (ex. VPSC). Cette approche pourrait potentiellement être réalisée en utilisant des techniques de l'apprentissage par variété, ce qui pourrait à la fois réduire le nombre de calculs ainsi que les temps de calcul.

2. L'apprentissage par variété appliquée à l'anisotropie poly-cristalline

L'apprentissage par « variété de formes » a été introduite par Raghavan et al en 2013 [3] pour la représentation d'ordre réduit de formes complexes rencontrées dans des problèmes mécaniques, tels que l'optimisation structurale industrielle [3], le retour élastique pendant l'emboutissage [4]; la caractérisation de métaux par l'indentation [5,6], la re-paramétrisation de microstructures [7,8] et, plus récemment, la correction par segmentation des homographes pour les composites tissés [9].

L'idée de base est tout simplement de définir l'espace de solutions caractéristiques du problème dans lequel évolue l'état de la solution, dit « espace latent ». La représentation réduite est généralement obtenue en déterminant (ou en imposant) la dimensionnalité intrinsèque du problème, souvent indépendante des paramètres originaux, et en approchant une hypersurface, c'est-à-dire une variété reliant toutes les solutions « admissibles ». Les données peuvent être représentées à l'aide de fonctions de niveaux, d'images, de cartes de pixels/voxels, etc. Le but peut également être de développer une paramétrisation optimale pour des formes arbitraires, où les paramètres doivent être définis a posteriori.

Cette approche est robuste, validée pour des cas divers, et nous donne la liberté de choisir le type et la forme de données, et est donc très adaptée à l'apprentissage de la texture cristallographique, généralement illustrée par les « figures de pôle ».

2.1. Base de données (matrice des clichés)

Pour construire la variété représentative du comportement plastique anisotrope du métal considéré, il est nécessaire de disposer d'une base de données de « clichés » de la microstructure et/ou de la texture cristallographique du matériau. Ces clichés peuvent être obtenus à partir des résultats générés par la diffraction des électrons par rétrodiffusion (EBSD) et/ou par des simulations numériques (phase d'apprentissage). L'objectif de la présente étude étant de valider la méthode d'apprentissage de variété dans le contexte de la plasticité anisotrope des métaux poly-cristallins, nous avons choisi de construire notre base de données numériquement, en utilisant le modèle micromécanique (VPSC), pour plus de détails voir section 2.4.

De manière générale, les figures de pôles obtenue expérimentalement à partir de l'EBSD ou numériquement illustrent la microstructure du matériau ainsi que la distribution de l'orientation des plans du réseau cristallographique, c'est pour cette raison que les figures de pôle sont ciblées dans ce travail. A partir des figures de pôles obtenues par des caractérisation expérimentales EBSD ou par des simulations numériques, on dispose d'une base de données de clichés. Celles-ci (toutes les textures de la base de données) sont assemblées dans une matrice dite « matrice des clichés », sous forme de

colonnes.

2.2. Décomposition en Valeurs Singulières

La décomposition en valeurs singulières (SVD) est utilisée pour déterminer la base réduite à partir de la matrice des clichés et pour pouvoir effectuer des projections dans l'espace de solutions dit « espace latent ».

La première étape de la méthode SVD est de « centrer » la matrice des clichés :

$$\mathbf{S} = [s_1 - \underline{s} \quad \dots \quad s_M - \underline{s}]$$

Ici, $s_1 \dots s_M$ sont les M clichés de figures de pôles, \underline{s} étant le cliché moyen.

La SVD de la matrice \mathbf{S} (dimensions $m \times n$) est une factorisation de la forme :

$$\mathbf{S} = \mathbf{\Phi} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T$$

Où $\mathbf{\Phi}$ est une matrice unitaire de dimension $m \times m$ (la base), $\mathbf{\Sigma}$ est une matrice diagonale rectangulaire de dimension $m \times n$ avec des nombres réels non négatifs (valeurs propres) sur la diagonale, et \mathbf{V} est une matrice unitaire de dimension $n \times n$.

Après utilisation de la SVD sur \mathbf{S} , nous obtenons donc, les coefficients de projection (les α) grâce à la relation suivante :

$$S^i = \underline{s} + \sum_{j=1}^M \alpha_j^i \phi_j$$

Où $[\alpha_1^i \dots \alpha_M^i]$ sont les coefficients de projection pour la figure de pôle s^i .

2.3. Apprentissage par variété dans l'espace des coefficients (α)

La décomposition orthogonale aux valeurs propres par la méthode des clichés (sans troncature) permet d'obtenir les coefficients α^i correspondants, réduisant/déterminant directement la dimensionnalité intrinsèque du problème. L'interpolation entre ces solutions produit une variété- α approchant l'espace réel des solutions admissibles [10].

L'hypothèse fondamentale est l'existence d'une hypersurface continue, de dimension réduite, permettant d'interpoler entre les formes. L'espace réduit est défini par les vecteurs de la base Φ . L'ensemble de figures d'apprentissage projetées sur cette base forme un nuage de points, permettant d'identifier la variété, en prenant en compte l'erreur de mesure. L'analyse de la dimension intrinsèque de la variété ainsi obtenue permet d'identifier le plus petit nombre des variables explicatives (variables latentes), permettant de représenter toute figure admissible.

Les textures physiquement *infaisables* sont facilement identifiées, c-à-d tout point (texture/figure de pôle) n'appartenant pas à la variété. Pour effectuer l'interpolation locale, il existe de nombreuses méthodes, comme, par exemple, l'approximation diffuse [14].

2.4. Génération de clichés

Pour valider la méthodologie précédemment présentée, nous utilisons ici une base de données de figures de pôle. Dans un contexte industriel, cette base de données devrait être issue de résultats expérimentaux générés par l'EBSD. Toutefois, dans un premier temps, nous testons la procédure en utilisant des figures de pôle obtenues par simulations. L'avantage principal de ce choix se trouve dans la facilité de générer des données abondantes, .De plus, avec ce choix, nous avons un meilleur contrôle des paramètres d'entrée utilisés pour construire la base de données, et s'agissant d'un modèle numérique, nous disposons *a priori* d'information sur les lois de comportement régissant la réponse du matériau.

Le modèle numérique retenu utilise l'approche d'homogénéisation Visco-Plastic Self-Consistent (VPSC) [12] pour générer des figures de pôle pour la base de données. Dans ce modèle, le comportement anisotrope du métal poly-cristallin est déterminé au moyen d'un schéma auto-cohérent dans lequel chaque grain est supposé plongé dans un milieu homogène équivalent (MHE). Ce milieu homogène équivalent ayant pour comportement mécanique le comportement du matériau poly-cristallin entourant le grain considéré. S'agissant de simulation dans le contexte de la plasticité, la formulation affine proposée par Masson et al [13], a été utilisée et dans chaque grain on suppose que 2 systèmes de glissement, Basal et de Pyramidal <c+a>, et un mode de maclage (compression) peuvent être activés. Sur ces 2 systèmes de glissement et pour le mode de maclage, on considèrera que la cission résolue critique est donnée, en fonction du cisaillement accumulé, par la loi de Voce :

$$\tau_c^\alpha = \tau_0^\alpha + (\tau_1^\alpha + \theta_1^\alpha \Gamma_g) \left(1 - e^{-\frac{\Gamma_g |\theta_0^\alpha|}{\tau_1^\alpha}} \right) \quad (1)$$

où τ_c^α , τ_0^α , τ_1^α , θ_0^α et θ_1^α sont les paramètres définissant la loi de Voce, Γ^g correspond au cisaillement cumulé et α correspond au système de glissement basal, au système de glissement pyramidal <c+a> ou au mode de maclage.

Pour tester la méthode, nous générons 2 bases de données de résultats de différents matériaux où chaque matériau a un comportement défini par le modèle auto-cohérent précédemment présenté. Dans la première base de données, nous considérons les résultats pour 800 matériaux dans lesquels un seul paramètre de comportement varie, le τ_0 du système de glissement basal. Dans la seconde, les résultats pour 900 matériaux sont générés, les τ_0 du système de glissement basal et du système de glissement pyramidal<c+a> variant d'un matériau à l'autre.

3. Résultats préliminaires et discussion

3.1. Cas test 1

Nous faisons varier le paramètre τ_0 associé à la loi de Voce régissant la plasticité due au système de glissement Basal, τ_0 étant choisi dans la plage [0,1 200] MPa sur un total de 800 tirages. A partir de ces 800 tirages on obtient autant de matériaux dont le comportement est régi par le même type de loi, seul le paramètre τ_0 associé au système de glissement basal variant d'un matériau à l'autre. On peut donc pour chacun de ces matériaux simuler, grâce à l'outil numérique VPSC, une traction uniaxiale dans une même direction et extraire des simulations la texture (généralement représenté par les figures de pôles) des matériaux déformés pour un niveau de déformation macroscopique de 0.305. En appliquant la méthodologie décrite en section 2, on peut obtenir, de la base de données des 800 textures obtenues après traction uniaxiale, une représentation dans l'espace des coefficients de projection α , ici illustrée avec les 3 premiers coefficients de projection (sachant que n'importe quel triplet peut être choisi dû à la nature de la variété de textures). La figure 1 illustre la variété ainsi obtenue.

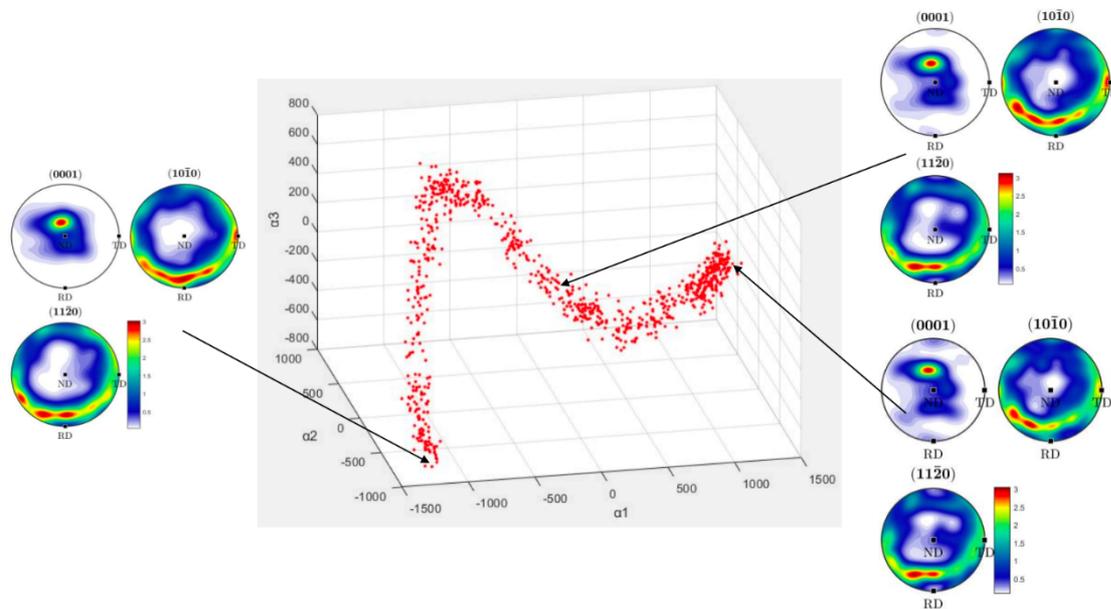


Figure 1 – « Variété de figures de pôle » générée en faisant varier un seul paramètre (τ_0 associé à la plasticité due au système de glissement Basal) et figures de pôle pour 3 textures (points de la variété).

On voit clairement que dans l'espace α , la variété est de dimension 1, ce qui signifie qu'entre chacune des 800 textures (et les figures de pôles associées) un paramètre (dominant) varie. Ce résultat, certes attendu puisqu'un seul paramètre de loi de comportement plastique varie d'un matériau à l'autre, confirme l'idée que la réduction de modèle mise en œuvre permet d'extraire la dimensionnalité intrinsèquement codée dans la texture du matériau. Sur la figure 1, les figures des pôles associées aux textures de 3 points de la variété sont également représentées.

3.1. Cas test 2

Pour poursuivre la validation de notre stratégie, on génère une base de 900 matériaux dont le comportement est toujours régi par le même type de loi de plasticité. Mais, dans ce cas test, d'un matériau à l'autre 2 paramètres de la loi de comportement peuvent varier, à savoir le paramètre τ_0 associé à la plasticité due au système de glissement Basal (dans la plage [0.1 200] MPa) et le paramètre τ_0 associé à la plasticité due au système de glissement Pyramidal $\langle c+a \rangle$ (dans la plage [0.1 250] MPa). En utilisant l'outil numérique VPSC, on peut simuler la traction uniaxiale de ces 900 matériaux et extraire de ces simulations les textures lorsque le matériau subi une déformation macroscopique de 0.305.

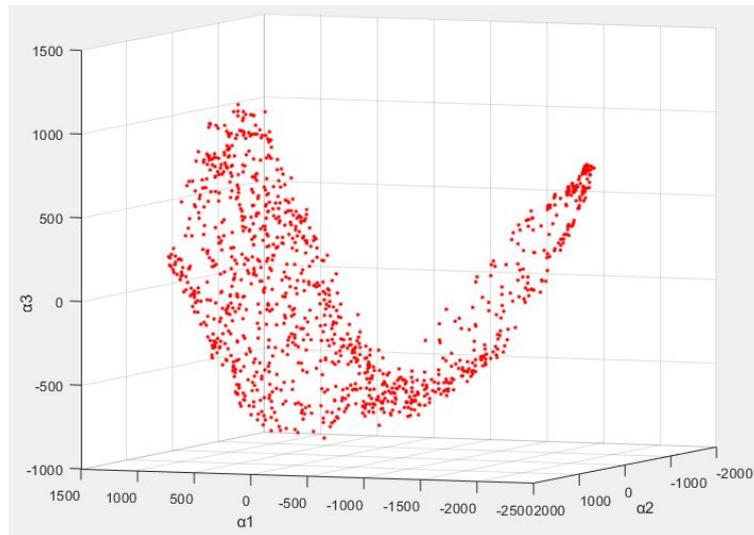


Figure 2 - Variété de forme générée en faisant varier deux paramètres (τ_0 associés à la plasticité due au système de glissement à la plasticité due au système de glissement pyramidal)

Des 900 textures obtenues, en suivant la méthodologie décrite en section 2, on obtient, figure 2, la variété associée à ces textures. Il apparaît clairement, et toujours comme on pouvait s'y attendre, que la variété (surfactive) est pilotée par 2 paramètres (dominants), prouvant ainsi que la plasticité codée dans les textures dépend de 2 variables.

4. Conclusion

En conclusion, une approche guidée par les données « sans modèle » pour caractériser la plasticité cristalline anisotrope dans les métaux, par apprentissage de variété de texture, représentée par des figures de pôle a été présentée. Cette méthode a été validée pour deux cas académiques de matériaux construits numériquement à partir du code d'homogénéisation VPSC, la dimensionnalité de la variété construite à partir des textures obtenues sur ces matériaux après traction uniaxiale correspondant bien à l'attendu. Lors de la communication orale, en complément de cette stratégie, nous illustrerons le lien qui peut être fait par cette méthode entre le comportement mécanique macroscopique de matériaux anisotropes (de type Zinc) et leur structure cristallographique.

Références

- [1] Hill, R., 1948. A theory of the yielding and plastic flow of anisotropic metals. Proc. R.Soc. A 193 (1033), 281–297.
- [2] Cauvin, L., Raghavan, B., Bouvier, S., Wang, X. & Meraghni, F. Multi-scale investigation of highly anisotropic zinc alloys using crystal plasticity and inverse analysis. Materials Science and Engineering: A 729, 106-118, 2018.
- [3] B Raghavan, L Xia, P Breitkopf, A Rassineux, P Villon, Towards simultaneous reduction of both input and output spaces for interactive simulation-based structural design, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 265, 174-185
- [4] G Le Quilliec, B Raghavan, P Breitkopf, A manifold learning-based reduced order model for springback shape characterization and optimization in sheet metal forming, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 285, 621-638

- [5] L Meng, P Breikopf, B Raghavan, G Mauvoisin, O Bartier, X Hernot, Identification of material properties using indentation test and shape manifold learning approach, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 297, 239-257
- [6] L Meng, B Raghavan, O Bartier, X Hernot, G Mauvoisin, P Breikopf, An objective meta-modeling approach for indentation-based material characterization, *Mechanics of Materials* 107, 31-44
- [7] L Xia, B Raghavan, P Breikopf, W Zhang, Numerical material representation using proper orthogonal decomposition and diffuse approximation, *Applied Mathematics and Computation* 224, 450-462
- [8] L Xia, B Raghavan, P Breikopf, Towards surrogate modelin of material microstructures through the processing variables, *Applied Mathematics and Computation* 294, 157-168
- [9] A Madra, P Breikopf, B Raghavan, F Trochu, Diffuse manifold learning of the geometry of woven reinforcements in composites, *Comptes Rendus Mécanique* 346 (7), 532-538
- [10] Meng, L., Breikopf, P., Quilliec, G. L., Raghavan, B. & Villon, P. Nonlinear Shape-Manifold Learning Approach: Concepts, Tools and Applications. *Archives of Computational Methods in Engineering* 25, 1-21, 2016.
- [11] Cauvin, L. et al. Investigating the plastic anisotropy and hardening behavior of a commercial Zn–Cu–Ti alloy: Experimental & modeling approach. *Mechanics of Materials*, 104103, 2021.
- [12] R. Lebensohn, C. Tome, A self-consistent viscoplastic model: prediction of rolling textures of anisotropic polycrystals, *Mater. Sci. Eng.: A* 175 (1) (1994) 71–82
- [13] R. Masson, M. Bornert, P. Suquet, A. Zaoui, An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals, *J. Mech. Phys. Solids*, 48 (6) (2000), 1203-1227
- [14] B. Nayroles, G. Touzot, P. Villon, Generalizing the finite element method: Diffuse approximation and diffuse elements, *Computational Mechanics* volume 10, pages307–318 (1992)