

***EVOLUTION DU NOMBRE DE
GRAINS ET DE LA TAILLE
MOYENNE DES GRAINS***

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

III-1- Introduction :

Ce chapitre est consacré à la simulation de la croissance des grains dans les matériaux et l'influence du nombre d'orientation sur l'évolution de cette croissance par la méthode Monte Carlo modifiée. Cette dernière a donné un essor considérable aux simulations de l'évolution de la microstructure. Cette technique de simulation est devenue populaire et indispensable dans l'étude des propriétés de la matière.

III-2- Procédure de simulation :

Dans notre travail, nous avons utilisé la technique de Monte Carlo pour simuler la croissance des grains. Cette méthode est effectuée sur un maillage de 200x200 sites représentant la microstructure bidimensionnelle. Le réseau contient donc 40000 sites distribués sur un motif hexagonal de réseau triangulaire dont ses nœuds sont appelés sites. En outre, chaque site possède 6 voisins. On associe à chaque site un numéro variant entre 1 et Q (Q est un entier) représentant le nombre d'orientation ou spin. Dans notre étude Q prend quatre valeurs différentes 50, 500, 2000, 4000 ce qui nous a permis de générer quatre matrices diverses.

Dans la matrice réelle, chaque site est décrit par les trois angles d'Euler ($\varphi_1, \Phi, \varphi_2$). Un grain est constitué d'un ensemble de sites adjacents ayant la même valeur d'orientation. Cependant, un joint de grain sépare deux sites voisins ayant deux nombre d'orientations différentes.

Dans notre travail, nous avons utilisé le logiciel Matlab pour écrire nos propres programmes afin de pouvoir :

- Tracer les microstructures.
- Réaliser la croissance normale des grains.
- Calculer le nombre de grains et tracer la distribution de taille des grains.

III-3- Algorithme de croissance :

La simulation de la croissance des grains dans les matériaux polycristallins par la méthode MC est basée principalement sur l'évolution de l'énergie potentielle des sites du réseau. Cette énergie est déterminée de l'interaction des sites avec leurs sites voisins dans le réseau. Autrement dit, la croissance des grains prend en considération l'énergie des joints de grains, elle tend à minimiser l'aire totale de ces derniers.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

La simulation de la croissance correspond à une réorientation des sites basée sur la minimisation de l'énergie du système, le processus de réorientation continue jusqu'à la stabilisation du système.

Dans cette étude, nous avons généré un état initial en attribuant à chaque site un entier Q . Parmi les 40000 sites du millage, un site est tiré au hasard, ce site « i » a pour nombre caractérisant l'orientation $Q(1)$.

L'énergie associée à chaque réorientation est donnée par la relation :

$$E_i = J \sum_{j=1}^6 (1 - \delta_{ij}) \quad (\text{III-1})$$

Où : J est une constante d'énergie définie à une échelle d'énergie du joint de grains,

δ_{ij} est le delta Kronecker.

Soit $E(1)$ l'énergie initiale du micro-système (site considéré – sites voisins) calculée par la relation (III-1). Une nouvelle valeur d'orientation $Q(2)$ attribuée au hasard au site i parmi les orientations de ses 6 proches voisins permet de calculer l'énergie $E(2)$ considérée comme état final.

L'excès d'énergie ΔE est donné par :

$$\Delta E = E(2) - E(1) \quad (\text{III-2})$$

Si ΔE est négatif ou nul la tentative de réorientation est acceptée, sinon le site garde son orientation initiale.

Par contre, si l'excès d'énergie est positif, le changement d'orientation est accepté avec une probabilité P , donnée par la relation :

$$P = \exp\left(-\frac{\Delta E}{K_B T}\right) \quad (\text{III-3})$$

K_B et T sont la constante de Boltzman et la température en degré Kelvin respectivement.

Pour accepter la nouvelle configuration, on tire au hasard un nombre entre 0 et 1 : s'il est inférieur à la probabilité P , la réorientation est acceptée, sinon elle est rejetée.

Le temps de calcul dans la simulation MC est mesuré en pas MONTE CARLO (MCS = MONTE CARLO Step), sachant qu'un pas MONTE CARLO est atteint lorsque tous les sites du millage, soit 200x200 sites, ont subi une tentative de réorientation.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

Les étapes de calcul sont résumées sur l'organigramme suivant :

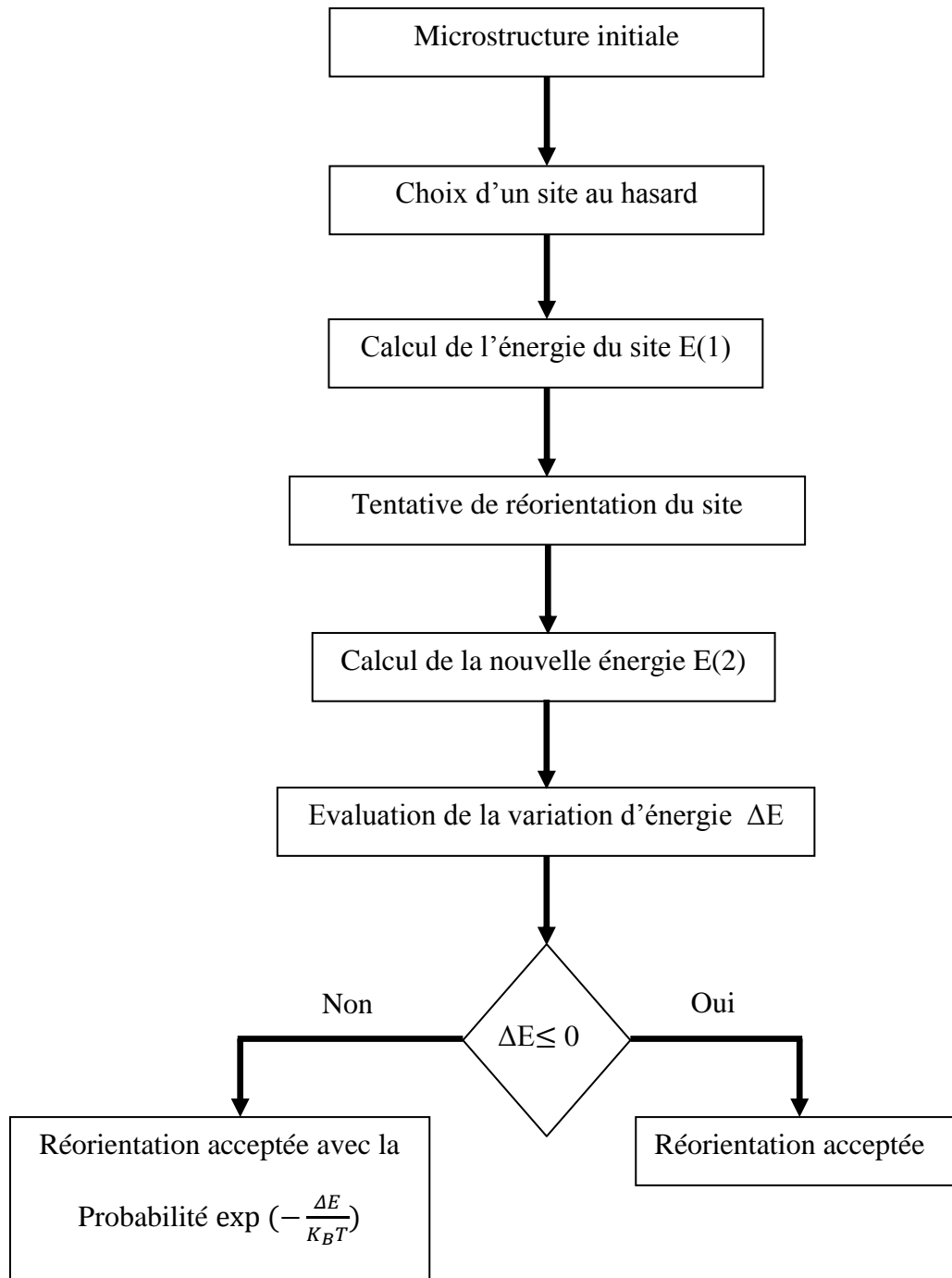


Figure III-3 : Organigramme de la simulation de la croissance cristalline par la méthode MC.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

III-4- Résultats et discussion :

III-4- 1 -Matrices initiales :

Dans notre travail, à l'aide du langage Matlab, nous avons généralisé plusieurs matrices avec des nombres d'orientations différents 50, 500, 2000, 4000 orientations que nous noterons M_1 , M_2 , M_3 , M_4 respectivement, afin de pouvoir suivre l'évolution de la croissance cristalline et de pouvoir déterminer l'impact de ce paramètre sur la croissance.

Le nombre des amas obtenus dans chacune des matrices généralisées M_1 , M_2 , M_3 , M_4 est 36935, 38990, 39159, 39176 respectivement. Il croît avec le nombre d'orientations car la probabilité de trouver deux sites voisins de même orientation diminue lorsque le nombre des orientations augmente et vis versa. La taille moyenne de ces amas dans les quatre matrices est de 1.06, 1.01, 1, 1 sites respectivement. Ce qu'il signifie que la majorité des sites voisins sont d'orientations différentes, ainsi, on ne peut pas parler de grains.

Afin d'obtenir des microstructures avec des grains bien clairs, nous subissons les matrices précédentes à une croissance pendant 20 mcs. Les sites voisins distribués sur un réseau hexagonal, ayant le même chiffre représente le même grain. Une telle indexation des sites permet de calculer le nombre total des grains de chaque matrice. A la fin, nous obtenons 1832, 2090, 2142, 2109 grains dans M_1 , M_2 , M_3 , M_4 respectivement. Ces matrices étant considérées comme matrices initiales (à 0 mcs), à partir de quelles nous allons étudier la croissance des grains. A cette étape, les grains de petits volumes envahissent tout l'espace des matrices avec une distribution de taille bien homogène comme le montre les figures (III-4, III-5, III-6, III-7) à 0 mcs. Le tableau (III-1) récapitule les résultats obtenus.

Matrice	M_1	M_2	M_3	M_4
Nombre d'orientations	50	500	2000	4000
Nombre des amas dans les matrices généralisées	36935	38990	39159	39176
Nombre de grains dans les matrices considérées initiales	1832	2090	2109	2142

Tableau III -1: Les nombres des grains à partir de nombre d'orientations.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

Les tableaux (III -2, III -3, III -4, III -5) résume l'évolution du nombre de grains dans les matrices M_1 , M_2 , M_3 , M_4 au cours de la croissance avec un relèvement de données chaque 200 mcs. Il est bien clair que le nombre des grains dans les quatre matrices diminue dans le temps, cela explique que certains grains croissent au dépend d'autres parfois jusqu'à leur disparition.

Temps (mcs)	0	200	400	600	800	1000
Nombre de grains	1832	270	141	99	74	53

Tableau III -2 : Evolution du nombre de grains dans la matrice M_1 (50 orientations).

Temps (mcs)	0	200	400	600	800	1000
Nombre de grains	2090	321	168	112	87	73

Tableau III-3 : Evolution du nombre de grains dans la matrice M_2 (500 orientations).

Temps (mcs)	0	200	400	600	800	1000
Nombre de grains	2109	355	183	114	89	68

Tableau III -4 : Evolution du nombre de grains dans la matrice M_3 (2000 orientations).

Temps (mcs)	0	200	400	600	800	1000
Nombre de grains	2142	373	208	117	96	81

Tableau III -5 : Evolution du nombre de grains dans la matrice M_4 (4000 orientations).

III-4- 2. Evolution de la croissance :

Dans cette simulation consacrée à la croissance normale des grains, nous avons suivi l'évolution des matrices M_1 , M_2 , M_3 , M_4 dont leurs données étaient stockées chaque 20 mcs. Pour faciliter l'étude de l'évolution de la croissance, nous avons utilisé un code de couleur, des cercles et des cadres sur les microstructures afin de pouvoir suivre certains grains dans les microstructures.

Dans les quatre matrices, nous avons suivi l'évolution de deux types de grains au cours de la croissance. Nous avons marqué « grain1 » les grains ayant 6 voisins, autrement dit, 6 joints de grains. Dans le deuxième, type les grains possèdent plus de 6 joints de grains. Ils sont notés « grain2 ».

Le poursuit des grains « grain1 » dans les matrices M_1 et M_2 (à 50 et 500 orientations) montre que ces grains croissent jusqu'à 400 mcs. A cette étape, ils gardent toujours 6 grains voisins. Après 600 mcs, le nombre de joints de grains diminue, ce qui cause une décroissance continue des grains (figure III-4, III-5).

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

Dans la matrice M_3 (2000 orientations), le grain1 décroît à partir de 200 mcs jusqu'à disparition à $t = 600$ mcs (figure III-6).

Dans la matrice, M_4 (4000 orientations) contrairement aux autres matrices, le grain 1 commence à croître entre 200 mcs et 400 mcs, puis il commence à décroître après 400 mcs malgré qu'il possède 6 voisins. Cette décroissance peut être due à la courbure des joints de grains et aussi à la taille de ces voisins, car il acquiert des voisins plus gros que lui (figure III-7).

Le dépouillement des microstructures montre que cette différences de comportement dans la croissance des grains « grain1 » est due à la forme des joints des grains, car nous remarquons que les joint de grains se déplacent vers leur centre de courbure [7].

Dans le cas des grains notés « grain2 », dont le nombre de voisins est supérieure à 6, nous remarquons qu'ils continuent à croître jusqu'à 1000 mcs dans toutes les matrices car ils ont un entourage favorable à la croissance.

Il est important de noter que la croissance ne se fait pas de la même manière à travers tous les joints, les joints courbés sont plus mobiles que les joint ayant un forme de segment, comme le montre le grain2 de la matrice M_4 entre 600 et 1000 mcs (indiqué par des flèches).

III-4- 3 - Evolution globale des microstructures :

L'évolution globale des microstructures sur les figures (III-4, III-5, III-6, III-7) montrent qu'il y a une croissance de certains grains au détriment de leurs voisins.

Afin de pouvoir donner un aspect quantitatif à cette étude, nous avons conçu un programme permettant de calculer le nombre de grains dans les matrices et suivre leurs évolutions dans le temps, ce qu'il nous a permis de tracer la courbe schématisée sur la figure (III-8).

La figure (III-8) montre que le nombre de grains diminue rapidement dans les quatre matrices, cette diminution est due à la disparition d'un nombre important de grains comme le montre les tableaux (III -2, III -3, III -4, III -5) car on passe 1832, 2090, 2109, 2142 à 270, 321, 355, 373, dans les matrices M_1 , M_2 , M_3 , M_4 respectivement, en 200 mcs seulement. Pendant les 200 mcs suivant le nombre de grains continue de baisser. Entre 400 et 600 mcs, les grains continuent à croître mais d'une manière plus lente que précédemment. Au delà de 600 mcs, la microstructure tend vers une stabilité où le nombre de grains devient pratiquement

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

constant dans l'ensemble des matrices M_1, M_2, M_3, M_4 où on note 53, 63, 73, 81 grains respectivement, à ce stade les gros grains envahissent les microstructures.

Le suivi des microstructures montre que les joints de grains disparaissent de deux manières si on prend en considération l'aspect topologique :

- 1- le mouvement des points triples : les zones cernées par des cercles montrent que leurs grains peuvent disparaître lorsque plusieurs points triples se rencontrent pour former un seul point triple.
- 2- le changement de voisins ; dans ce cas deux points triples se rencontrent le long d'un joint. Puis ils séparent perpendiculaire comme il est illustré sur les zones en cadrées en rouge [16].

La figure (III -5) montre que le nombre d'orientations avait un impact sur la croissance des grains mais d'une manière moins pertinente comme nous l'avons prévu. Parmi les paramètres qui peuvent être la cause de ces résultats l'apparition de problème de la coalescence des grains. Cette dernière se produit lorsque deux grains de même orientation sont en contact, le joint qui les sépare disparaît et les deux grains deviennent un seul grain, comme le montre nettement la figure (III -4) à 1000 mcs. Afin d'éviter ce problème, il faut réindexer les matrices de sorte que les grains ayant la même orientation doivent prendre des indices différents.

Remarque : Nous avons commencé de nouveaux calculs mais malheureusement le temps était assez court pour améliorer et réexécuter les programmes.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

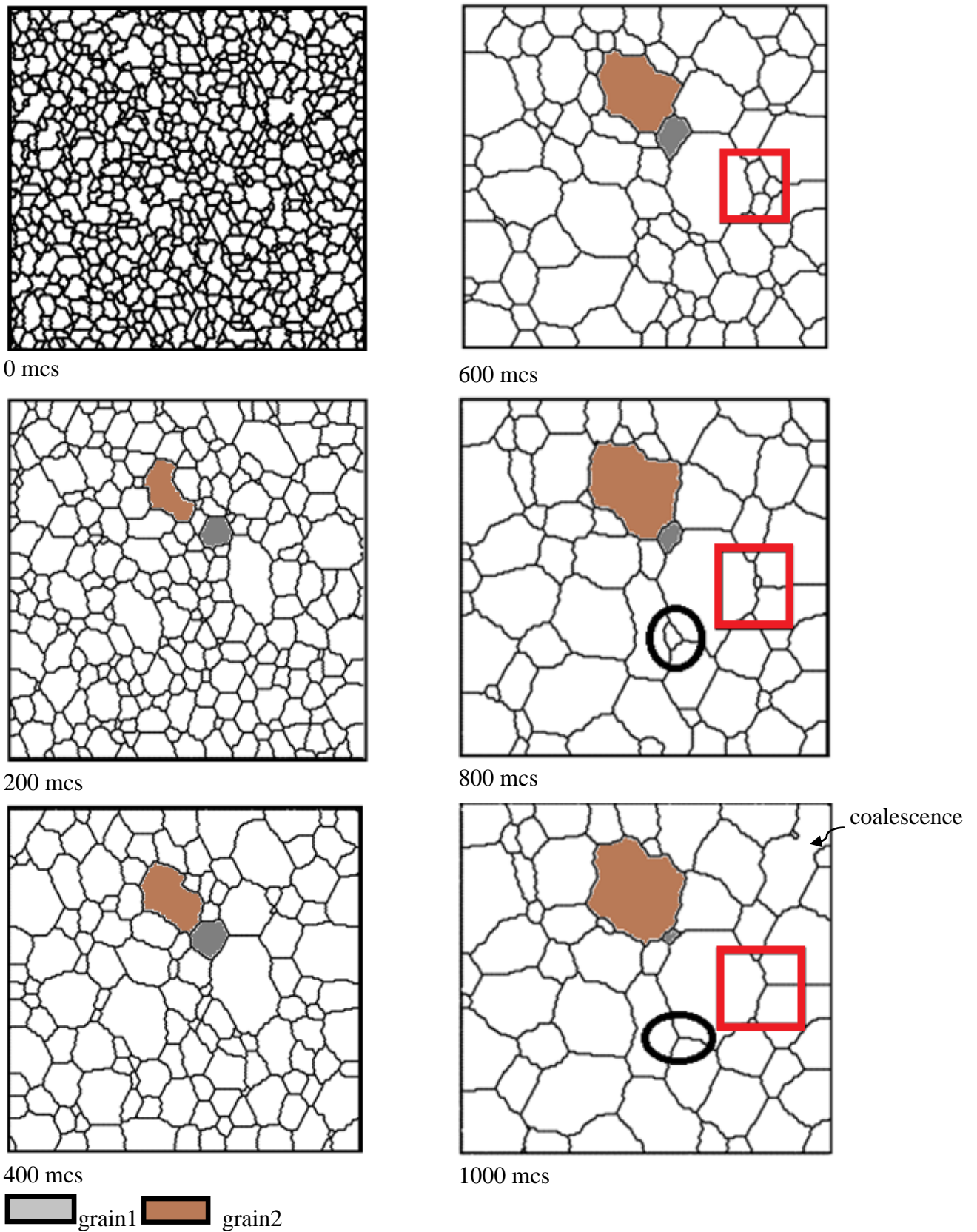
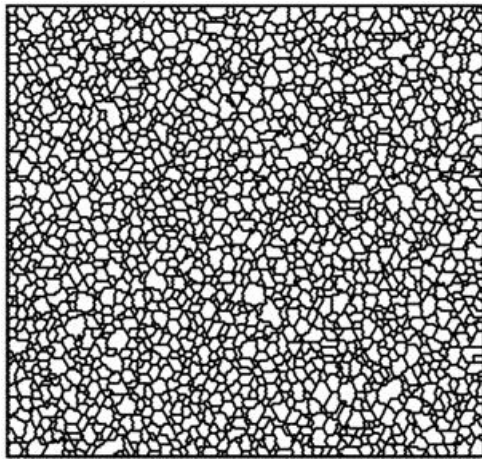
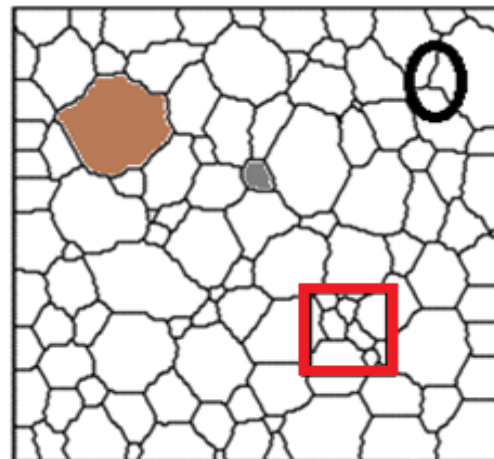


Figure III-4 : Evolution de la microstructure de croissance de la matrice M_1 (50 Orientation).

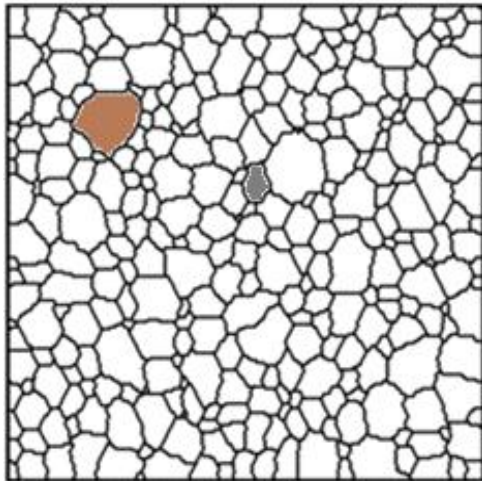
Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains



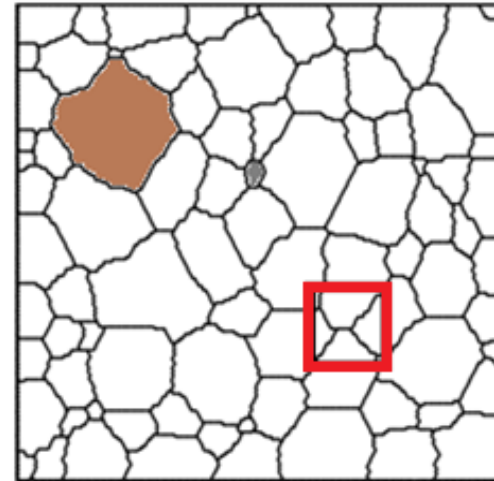
0mcs



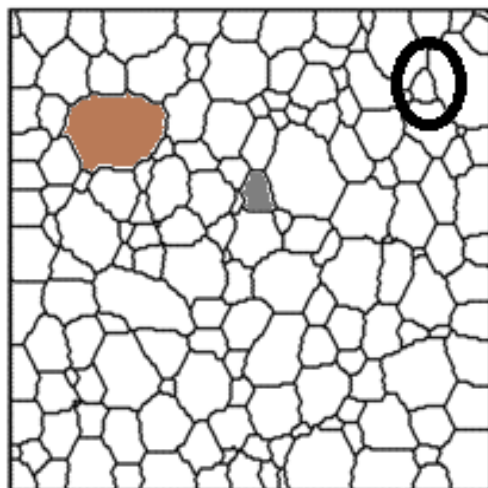
600mcs



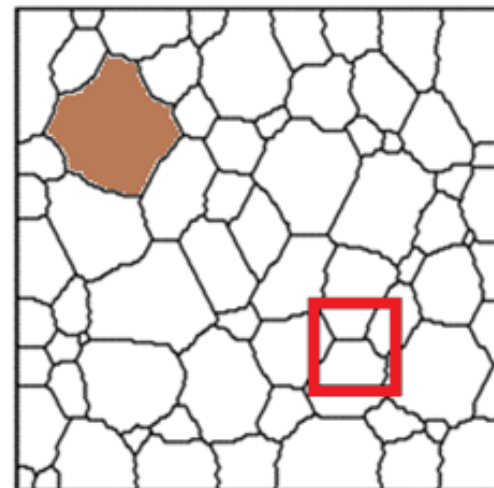
200mcs



800mcs



400mcs



1000mcs



Figure III-5 : Evolution de la microstructure de croissance de la matrice M_2 (500Orientation)

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

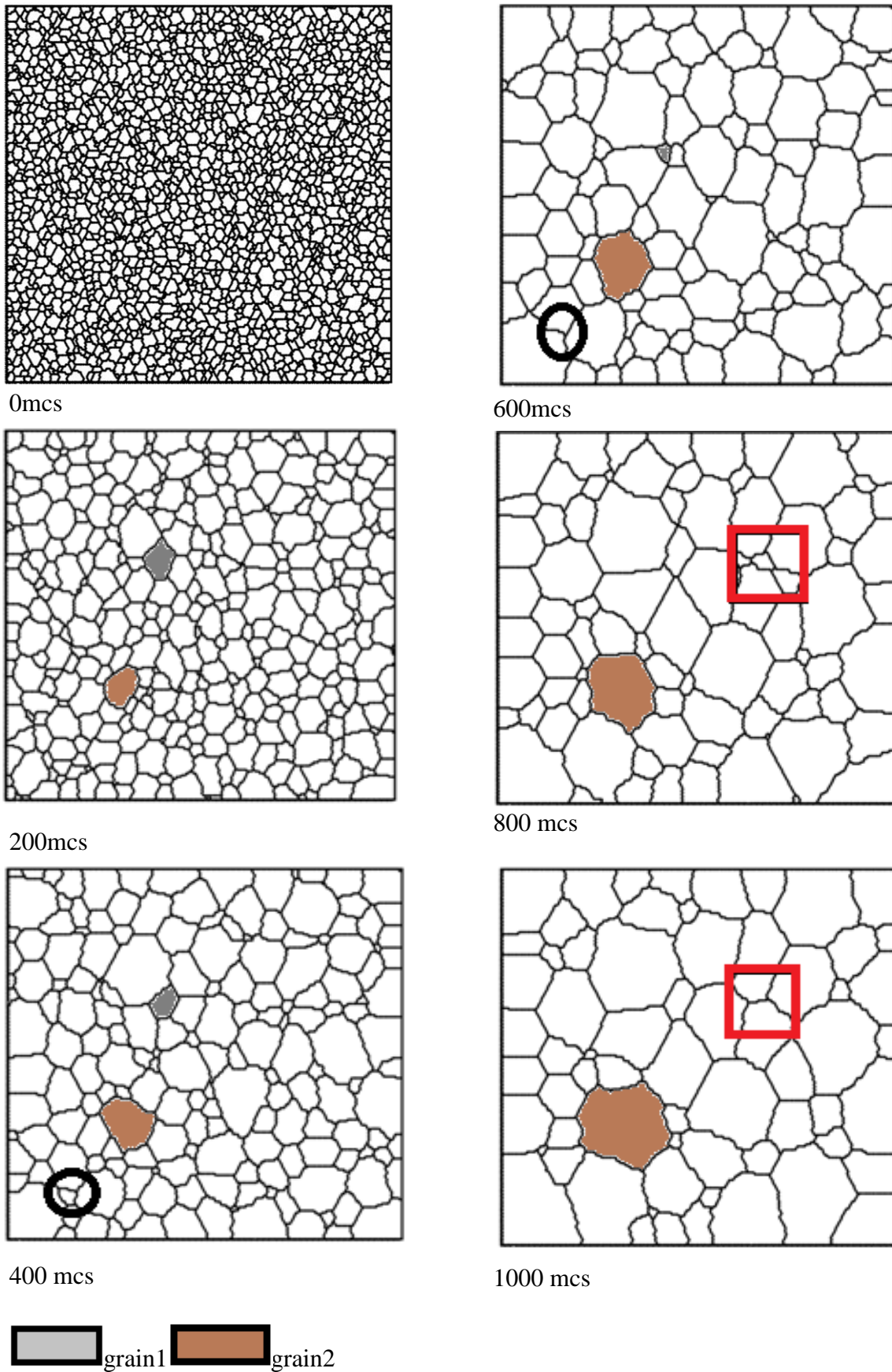


Figure III-6 : Evolution de la microstructure de croissance de la matrice M_3 (2000Orientation)

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

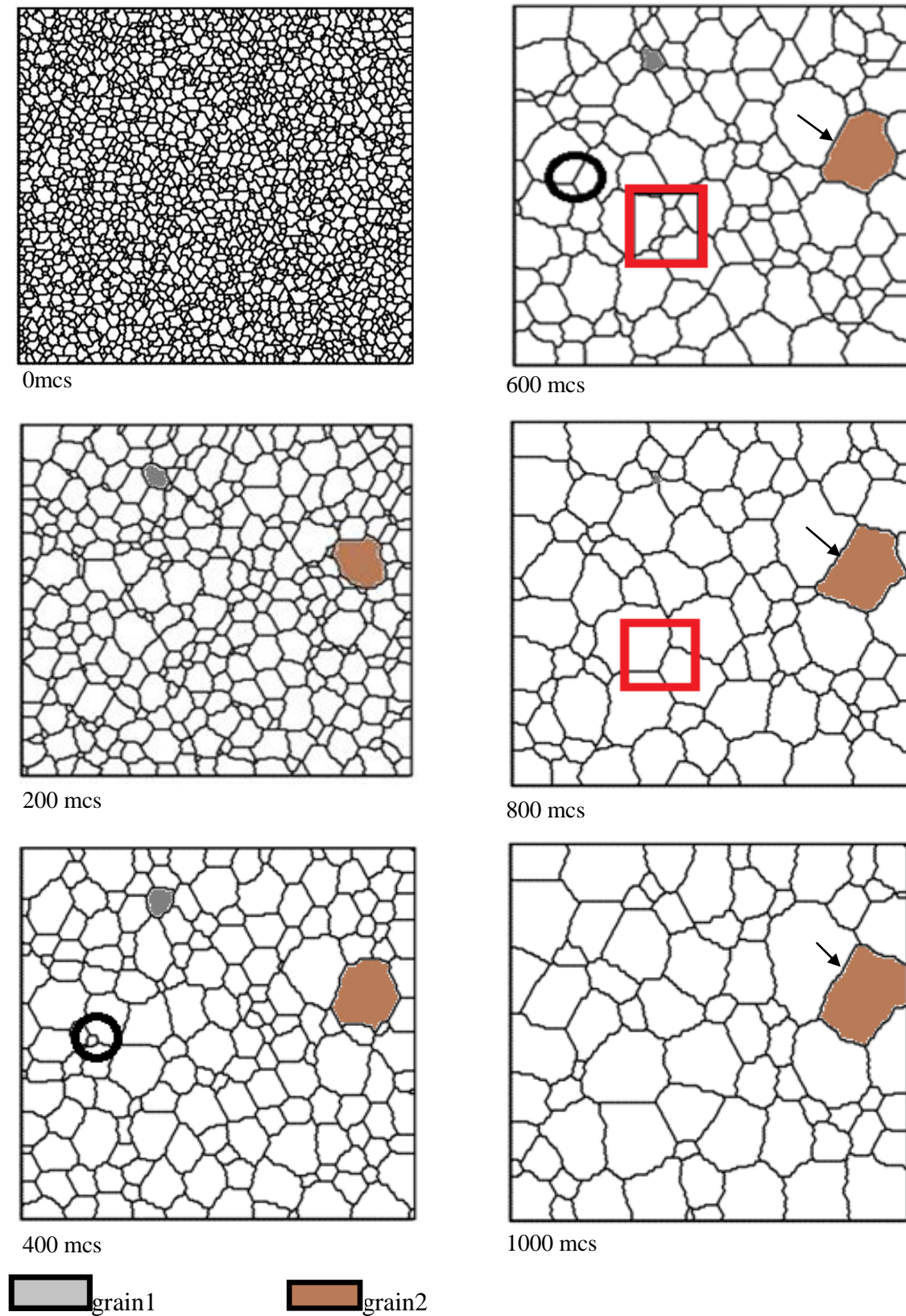


Figure III-7 : Evolution de la microstructure de croissance de la matrice M_4 (4000 Orientation).

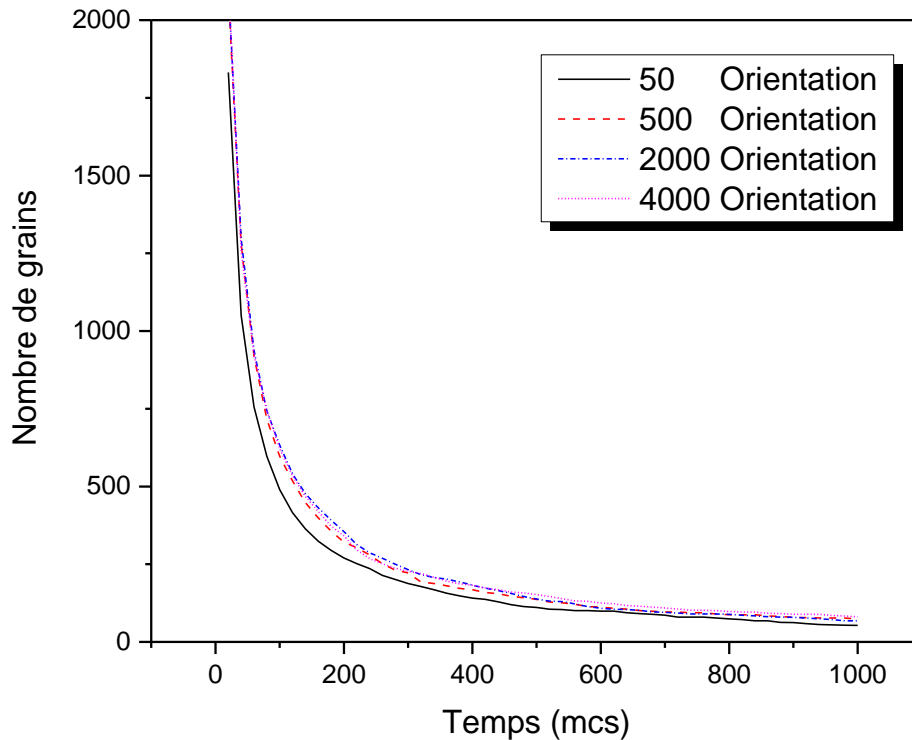


Figure III-8 : Evolution de nombre de grains au cours de la croissance à différentes orientations.

III-4- 4 -L'influence de l'effet de taille sur la croissance des grains :

Nous avons suivi l'évolution de la croissance et contrôlé son comportement par l'effet de taille en traçant les distributions de tailles, après caractérisation des matrices M_1 , M_2 , M_3 , M_4 par indexation des sites. Les figures (III-9, III-10, III-11, III-12) représentant ces distributions de tailles des grains au cours de la croissance montrent que :

- à 0 mcs : la distribution de tailles montre que les classes de tailles ayant 0 à 40 sites sont très importantes dans les 4 matrices. Elles représentent plus de trois quart du nombre total des grains dans les matrices M_1 , M_2 , M_3 , M_4 . Les tailles moyennes des grains dans ces dernières à 0 mcs sont respectivement $\langle t_{M_1} \rangle = 21.40$ sites, $\langle t_{M_2} \rangle = 18.76$ sites, $\langle t_{M_3} \rangle = 18.60$ sites et $\langle t_{M_4} \rangle = 18.31$ sites. Nous remarquons que toutes ces tailles appartiennent à la fourchette [0 - 40 sites]. D'une autre part, ces tailles moyennes sont trop proches à l'exception de celle de la matrice M_1 (50 orientations) qui est un peu supérieure à toutes les autres valeurs. En se rapportant aux histogrammes à 0 mcs, nous trouvons que cette matrice possède des grains ayant des tailles entre 100 et 160 sites, alors que les tailles des grains dans les trois autres

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

matrices ne dépassent pas les 100 sites. En y retournant à la microstructure initiale (0mcs), nous pouvons remarquer que d'après la forme de certains grains, il y a une disparition brusque de certains joints de grains due à la rencontre des grains de même orientation provoquent le phénomène de coalescence.

D'après les figures (III-9, III-10, III-11, III-12), nous déduisons que les classe de tailles des grains évoluent dans le temps et changent régulièrement.

- à 200 mcs : les classes de tailles s'étalent comme suit : la matrice M_1 de 0 à 1000 sites, M_2 de 0 à 600 sites, M_3 de 0 à 440 sites et M_4 de 0 à 600 sites. La majorité des grains prennent une taille entre 0 et 200 sites dont les tailles moyennes des matrices 145.73 sites, 122.51 sites, 120.74 sites et 115.30 sites en faites partie. En revanche, il y a une minorité de grains qui croît excessivement.

- à 400 mcs : à cette étape les classes de taille s'élargissent toujours, elles atteignent les 1000 sites dans les matrices M_2 , M_3 , M_4 alors que dans la matrice M_1 on trouve un grain de taille supérieure à 1500 sites. Les tailles moyennes des matrices (M_1 , M_2 , M_3 , M_4) sont 280.03 sites, 234.75 sites ,225.41 sites et 216.60 sites respectivement, ces tailles appartiennent à la fourchette des tailles de grains les plus fréquents dans les matrices.

-à 600 mcs : nous remarquons l'apparition de nouvelles classes de tailles entre 1000 et 2300 sites dans la matrice M_1 et entre 800 et 1500 sites dans les autres, alors que la majorité des grains sont de tailles entre 0 et 400 sites dont les tailles moyennes des matrices 353.19 sites, 346.39 sites, 316.13 sites y appartiennent.

- à 800 mcs : les distributions de tailles évoluent toujours, mais cette fois-ci d'une manière plus lente que précédemment, car il y a seulement quelques nouvelles classes de tailles qui apparaissent par rapport aux temps antérieurs.

Les tailles moyennes sont : 552.17 sites, 455.86 sites, 441.22 sites et 412.67 sites. A cette étape de la croissance, la distribution de tailles évolue vers des classes de grandes tailles [32].

- à 1000 mcs : nous n'observons pas une variation rapide des classes de tailles, ces dernières prennent de grandes valeurs par rapport au volume total de la matrice. Les tailles moyennes des quatre matrices à cette étape sont : 753.92 sites, 544.31 sites, 553.143 sites et 490.09 sites. Lorsqu'on compare ces valeurs avec les classes de tailles de cet état final qui sont entre 1500 et 3000 sites, on remarque que les grains sont largement gros par rapport à la taille moyenne de chaque matrice.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

Lorsqu'on regarde les grains dans les microstructures sur les figures (III-9, III-10, III-11, III-12) et les distributions de tailles à l'état final, on trouve que les grains prennent presque les mêmes tailles et que la croissance des ces grains tend à être stable par rapport à 800 mcs.

Maintenant, si on poursuit l'évolution des distributions de tailles dans une même matrice de 0 mcs à 1000 mcs, on remarque que certaines classes restent le long de la croissance par rapport aux autres classes comme exemple la classe à 200 sites entre 400 mcs et 1000 mcs.

En revanche, quand on poursuit l'évolution de cette classe dans le temps, on trouve que son nombre de grains diminue d'une manière très marquante, comme dans le cas des classes (0 - 40 sites) pendant les 200 mcs premiers. Vu qu'on a une conservation de la matière durant toute la croissance la disparition rapide de ces grains met en évidence un grossissement rapide des autres grains surtout aux premiers stades de la croissance.

Autrement dit, au début de la croissance, le nombre de grains qui disparaissent est élevé. Dans les états avancés de la croissance, la distribution des tailles de grains évolue vers les classes des grandes tailles où elle se rapproche de la stabilité.

Lors de la croissance, nous observons l'étalement de tailles vers les classes de tailles plus importantes, avec un maintien des petites classes de tailles. Le nombre des petits grains n'est plus important, indiquant que la matrice va atteindre le palier de stabilité.

La courbe schématisée sur la figure (III-13) représente l'évolution de la taille moyenne des grains au cours de la croissance dans les 4 matrices ayant des nombres d'orientations différents. Lorsqu'on augmente le temps de calcul, on observe que la courbe de la taille moyenne dans la matrice à 50 orientations augmente plus rapidement que les autres matrices à 500, 2000 et 4000 orientations. Le tableau (III -6) résume l'évolution du taille moyenne de grains dans ces matrices M_1 , M_2 , M_3 , M_4 au cours de la croissance avec une relevé de données chaque 200 mcs. Lorsque le nombre d'orientations est petit, il conduit à une augmentation des diamètres des grains considérable. Dans le cas contraire, la taille moyenne des grains (diamètre) s'accroît plus lentement que le nombre d'orientations augmente.

L'explication donnée à un tel résultat est que lorsque le nombre d'orientations est faible la probabilité de trouver un voisinage adéquat à la croissance est plus importante.

D'une autre part, nous remarquons que dans le cas des quatre matrices la croissance est restée normale, sans avoir déclenchement de la croissance anormale, ce qui conduit à dire qu'il existe d'autres paramètres qui peuvent provoquer une croissance sélective de certains grains

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

au dépend des autres. On ne conclut que ce paramètre d'orientations à une influence sur l'évolution des microstructures et la cinétique de la croissance.

Matrice	M ₁	M ₂	M ₃	M ₄
Temps (mcs)	Taille moyenne (sites)			
0	21.41	18.77	18.59	18.31
200	145.73	122.75	120.74	115.30
400	280.03	234.75	225.41	216.59
600	400.04	353.19	346.39	316.16
800	552.17	455.86	441.22	412.67
1000mcs	753.92	544.50	535.13	490.05

Tableau III -6 : Evolution de la taille moyenne des grains dans les matrices M₁, M₂, M₃, M₄.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

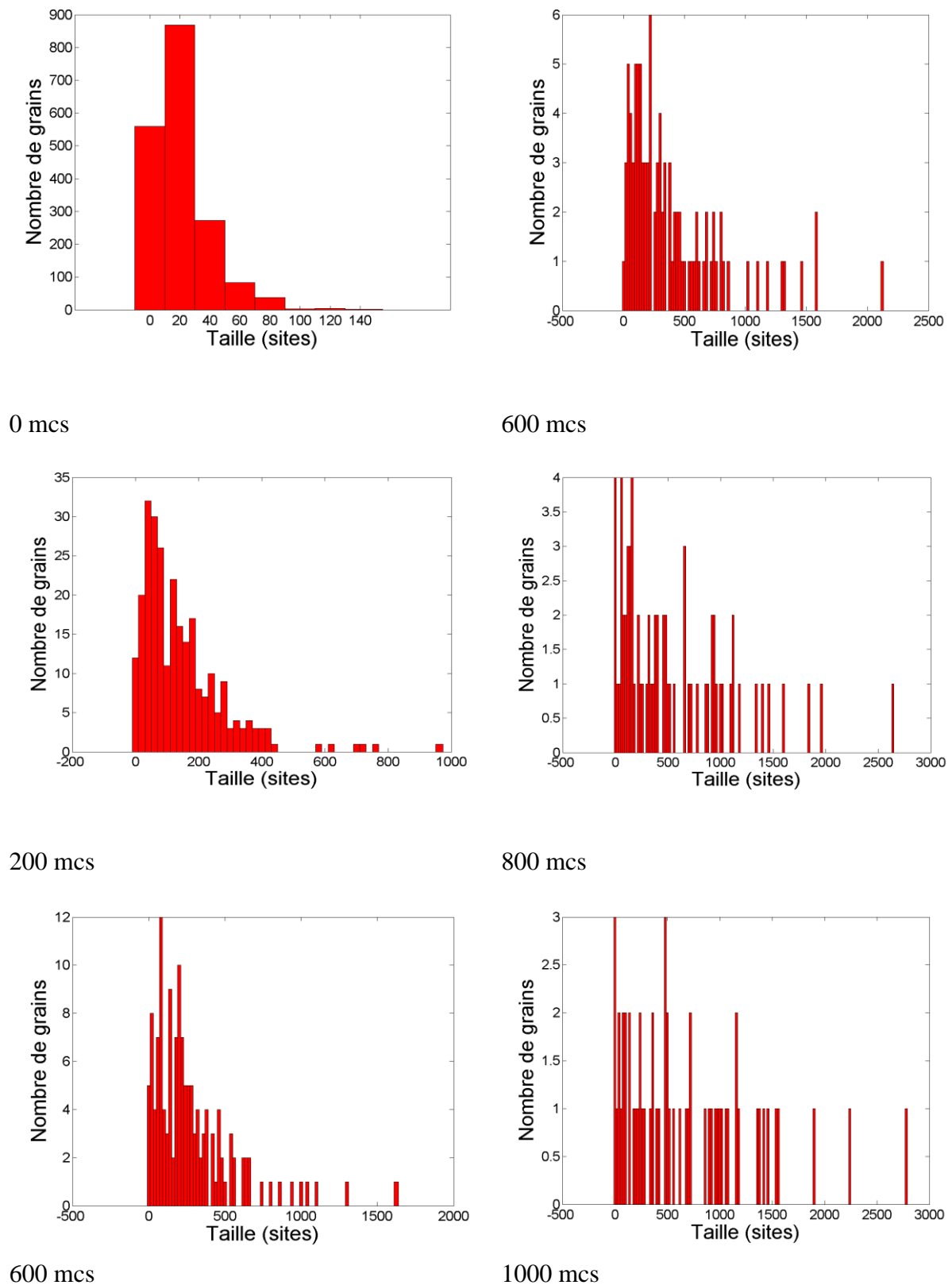


Figure III-9 : Evolution de la distribution des tailles de grains dans la matrice M_1 à 50 orientations au cours de l'évolution de la croissance.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

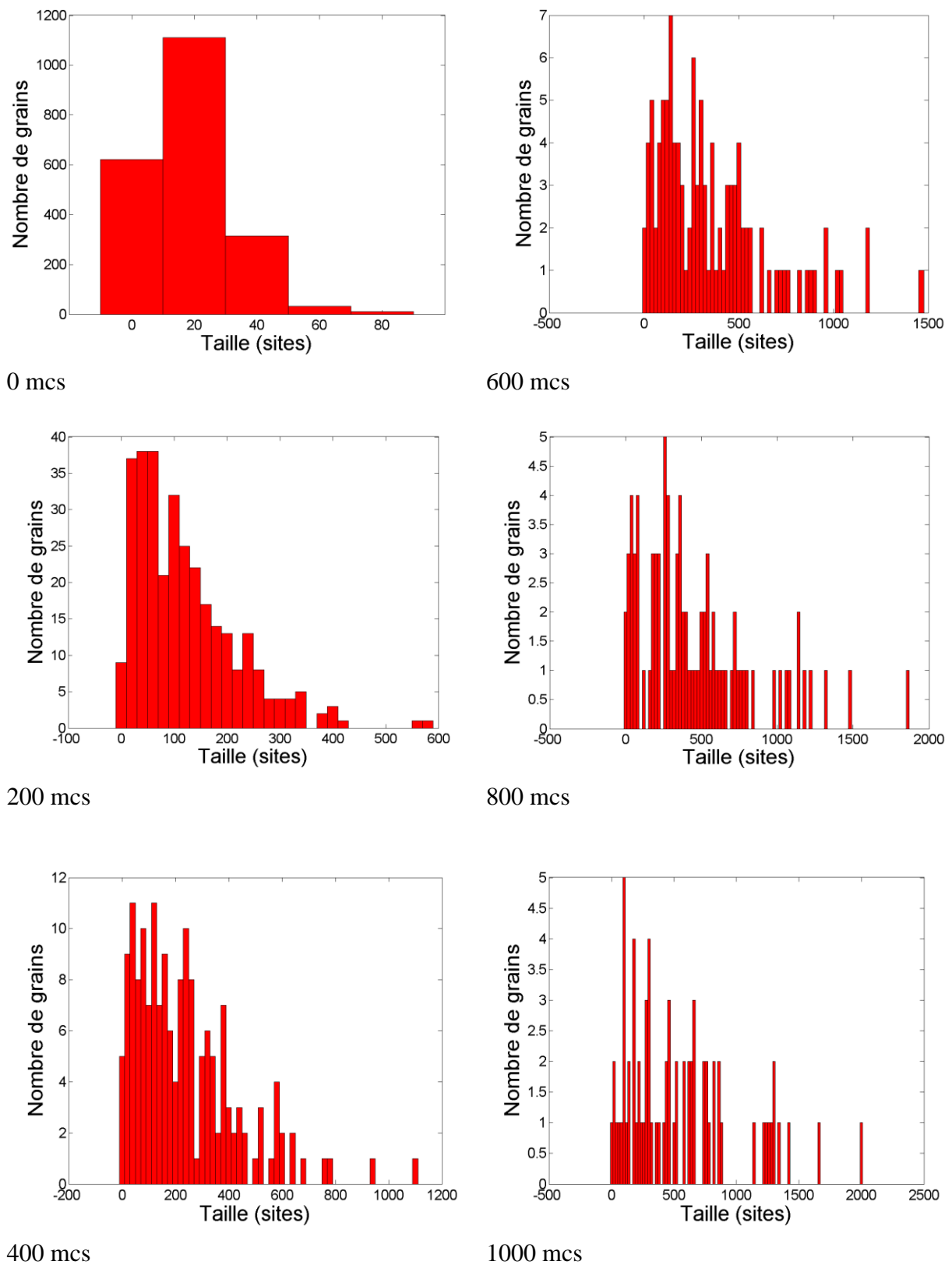


Figure III-10 : Evolution de la distribution des tailles de grains dans la matrice M_2 à 500 orientation au cours de l'évolution de la croissance.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

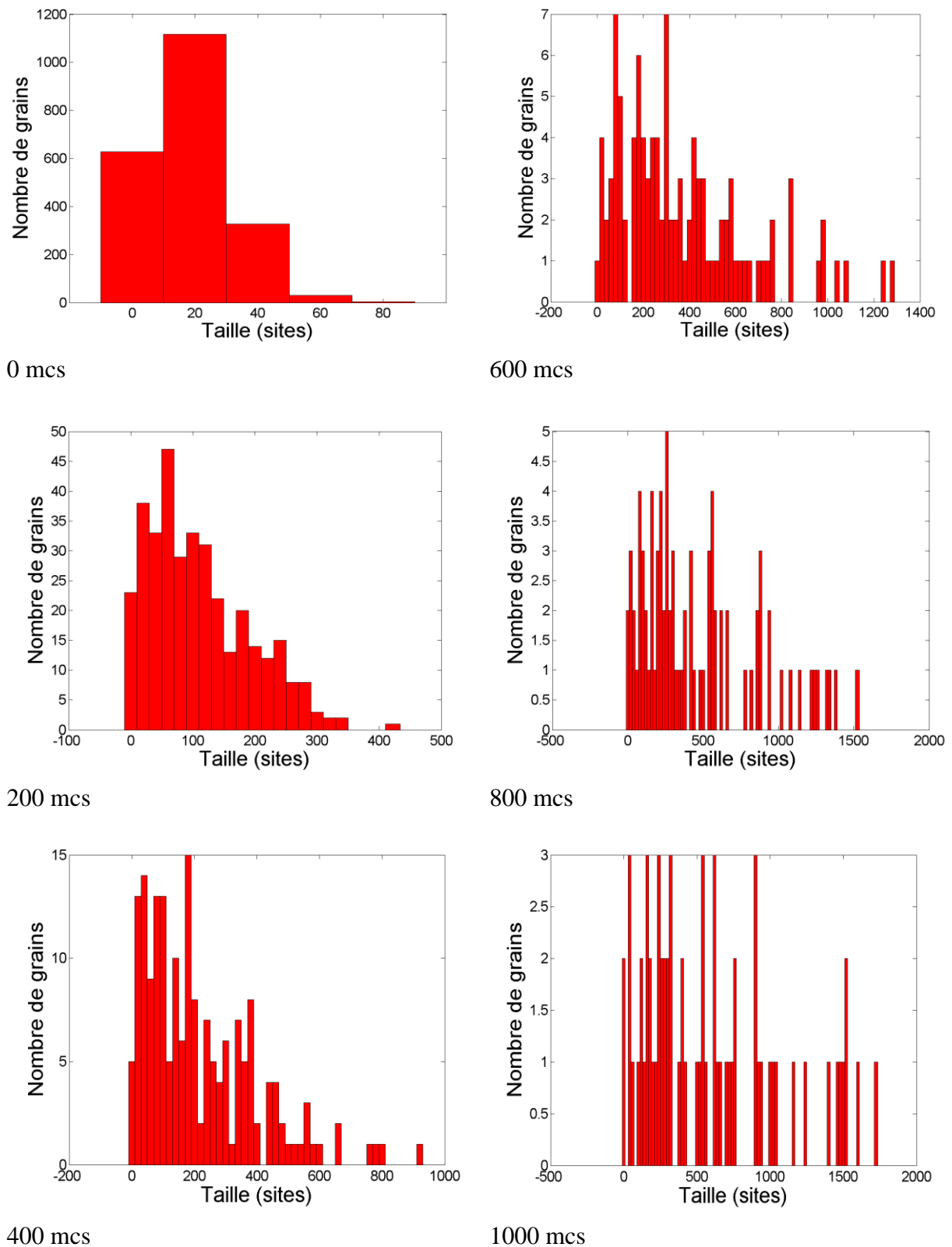


Figure III-11 : Evolution de la distribution des tailles de grains dans la matrice M_3 à 2000 orientation au cours de l'évolution de la croissance.

Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

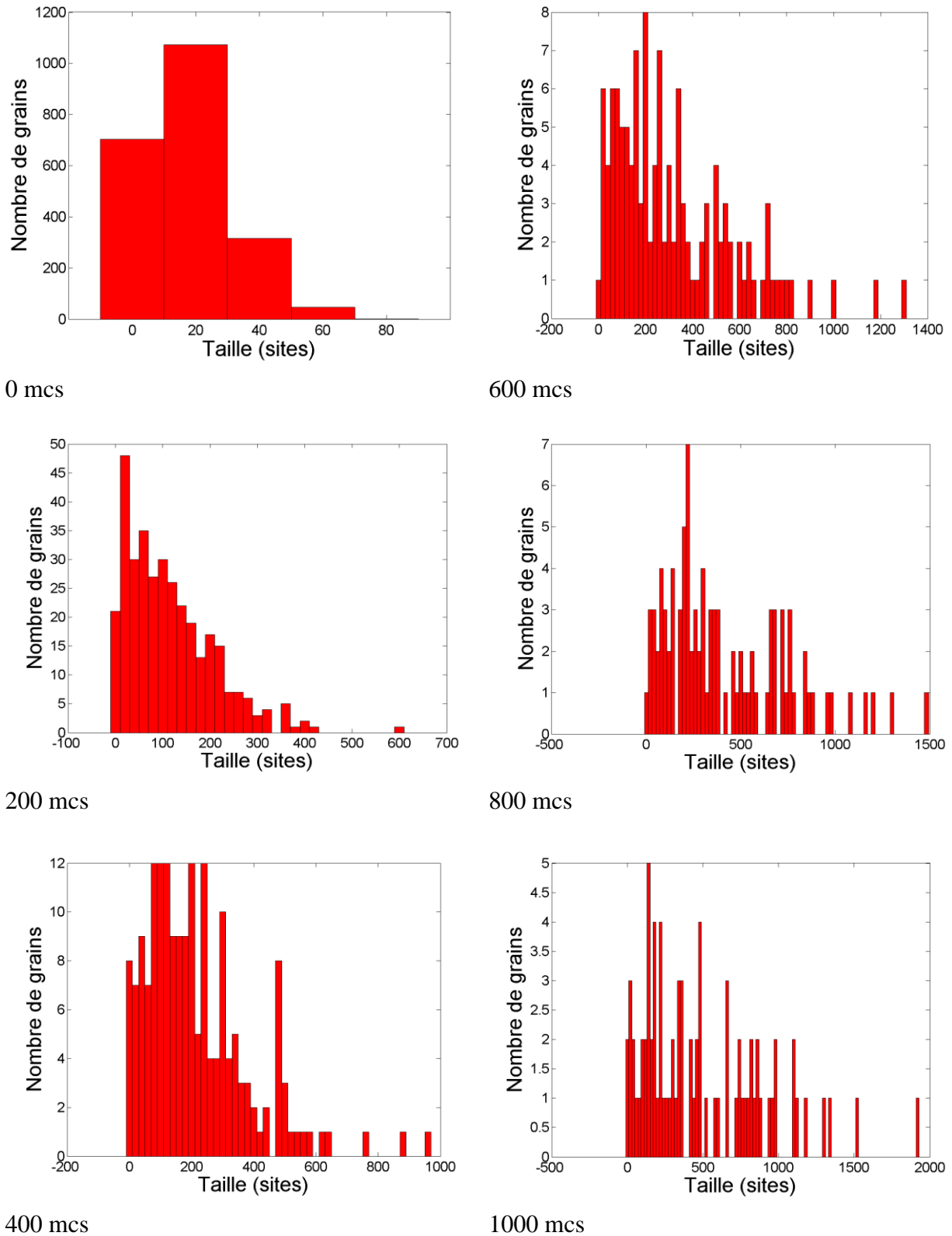


Figure III-12 : Evolution de la distribution des tailles de grains dans la matrice M_4 à 4000

orientation au cours de l'évolution de la croissance.

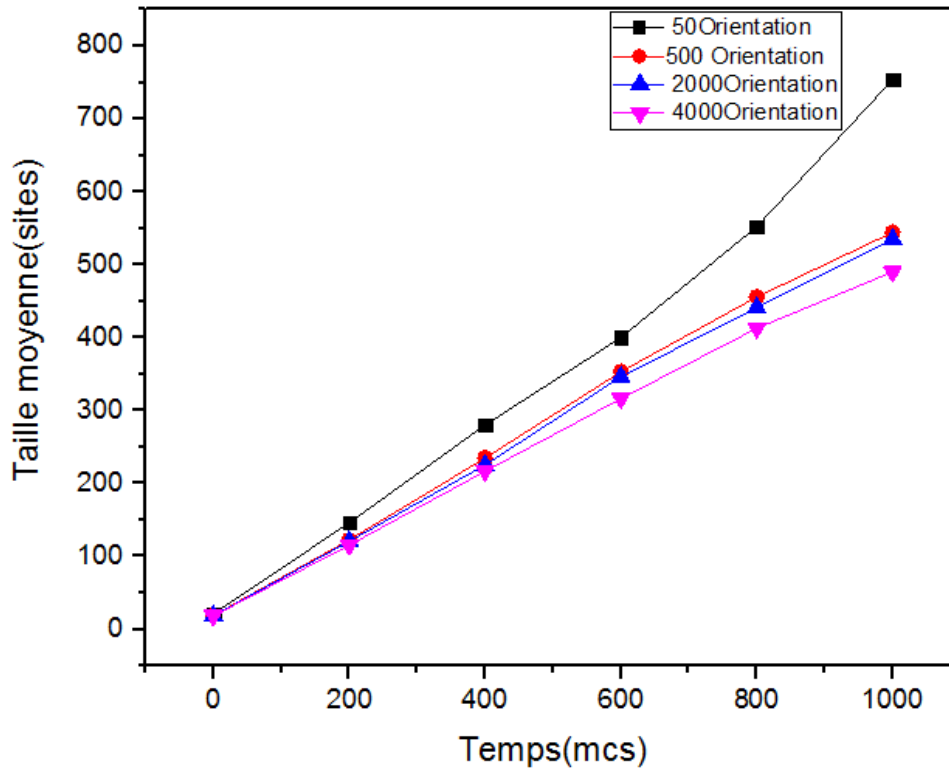


Figure III-13 : l'évolution de la taille moyenne des grains au cours de la croissance dans les matrices à 50,500,2000,4000 orientation au cours de croissance.