

Réduction de la dimensionnalité de textures de métaux polycristallins

Bingqian Li¹, Ludovic Cauvin¹, Piotr Breitkopf¹, Jianqiang Jin¹

¹ Université de Technologie de Compiègne, Roberval (Mechanics, energy and electricity),
Centre de recherche Royallieu, CS 60319, 60203 Compiègne Cedex, France
E-mail addresses: Bingqian.Li@utc.fr; Ludovic.Cauvin@utc.fr; Piotr.Breitkopf@utc.fr

Résumé — Compte tenu de la dépendance du comportement des matériaux polycristallins métalliques à leur texture, la réduction de la dimensionnalité des données expérimentales paraît souhaitable pour établir un modèle multi-échelle. Dans cette étude, l'analyse en composantes principales est appliquée à un ensemble de fonctions d'orientation cristalline, issues des observations par microscopie à balayage. Puis, une variété de textures admissibles est construite dans l'espace latent, permettant l'interpolation des textures intermédiaires, en fonction des paramètres du process.

Mots clés — Plasticité cristalline, réduction de modèle, apprentissage automatique, I-GAIA.

1 Introduction

Avec l'émergence de nouveaux procédés de mise en forme tel que la fabrication additive, l'utilisation des matériaux métalliques connaît un nouvel essor. Dans le même temps, les moyens de caractérisation expérimentale disponibles aussi bien en laboratoire que dans l'industrie conduisent à une grande quantité de données, très partiellement utilisées dans la phase de dimensionnement du processus de conception, ce dimensionnement étant souvent réalisé grâce à des simulations par éléments finis.

Le comportement d'un matériau métallique polycristallin, en particulier sa réponse plastique, est fortement dépendant de sa texture initiale et des évolutions de cette dernière lors du chargement [1], que ce soit lors de la phase de mise en œuvre ou en raison des sollicitations en service. La Microscopie Électronique à Balayage (MEB) et l'analyse par diffraction d'électrons rétrodiffusés (EBSD) sont souvent utilisées pour étudier les textures de ce type de matériaux, données par la fonction de distribution des orientations. Les valeurs discrètes de cette fonction sont stockées dans un fichier ODF (Orientation Distribution Function), permettant de représenter la texture d'un matériau par des projections stéréographiques appelées figures de pôles.

Pour exploiter la richesse des données expérimentales disponibles pour les matériaux métalliques dans le processus de dimensionnement numérique, de nouvelles techniques doivent être développées. Dans la continuité de précédents travaux [2], on s'intéresse ici à l'utilisation de techniques de réduction de modèle pour traiter la grande quantité d'informations données dans les fichiers ODF sur la texture du matériau. L'Analyse en Composantes Principales (ACP) est un outil puissant pour traiter les données de haute dimension et pour en extraire la dimensionnalité intrinsèque [3]. Nous présentons donc ici une application de l'ACP au contexte de la plasticité cristalline, centrée, pour l'instant, sur l'évolution de la texture cristalline d'un matériau virtuel. Pour bien illustrer notre approche, les défis et les solutions envisagées, ainsi que pouvoir comparer des approches, nous proposons un cas test abstrait volontairement indépendant d'un matériau particulier.

Dans un premier temps, nous montrons donc les défis associés aux données de texture cristalline. Nous présentons ensuite l'implémentation de l'ACP en présence des variables périodiques et l'approximation de la variété des textures. Enfin, une application académique permet d'illustrer l'ensemble de la méthode.

2 Défis associés aux données de texture cristalline

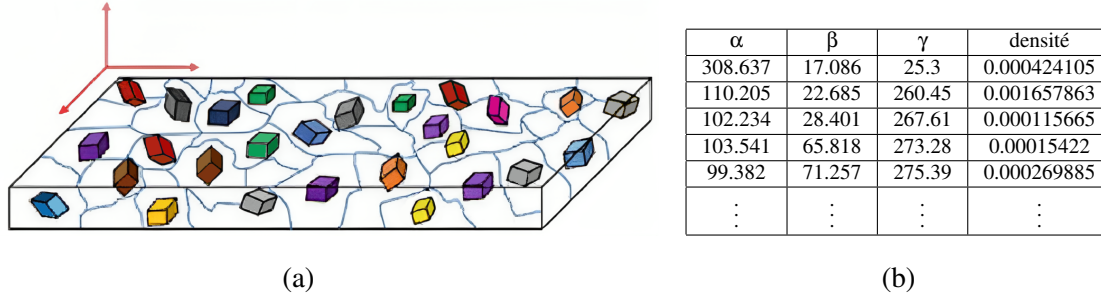


FIGURE 1 – Texture : (a) Orientations cristallines dans un échantillon ; (b) extrait d'un fichier ODF.

On considère un échantillon métallique. En l'observant au MEB et en l'analysant par EBSD, il est possible de déterminer l'orientation de chacun des cristaux de l'échantillon (Figure 1a), ces orientations sont données par un fichier ODF (Figure 1b). Ce type de fichier est constitué de 4 colonnes et de N lignes, où N est le nombre d'orientations détectées sur les grains. L'orientation est donnée par 3 angles d'Euler, dans les 3 premières colonnes, et la densité de cette orientation dans l'échantillon est donnée en 4^{ème} colonne.

Soit une texture \mathcal{T} ,

$$\mathcal{T} = [\alpha, \beta, \gamma, d], \quad (1)$$

où α, β, γ, d sont tous des vecteurs contenant, pour chaque orientation, les 3 angles d'Euler (la précession, la nutation, la rotation propre) et la densité, respectivement.

La texture \mathcal{T} est donc stockée dans une matrice de taille $N \times 4$.

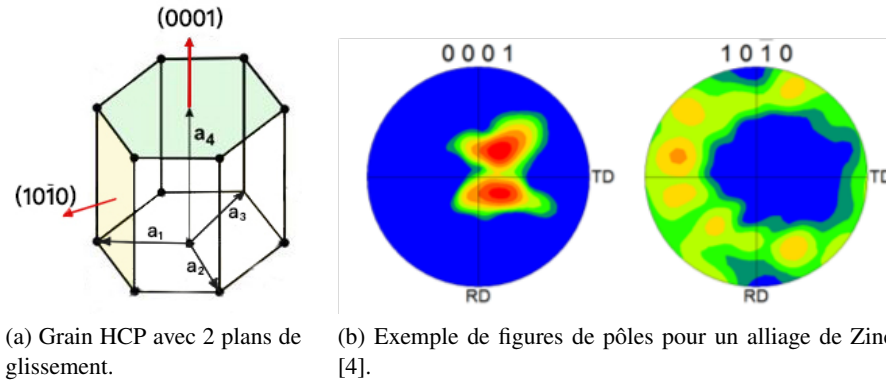


FIGURE 2 – Représentation d'un matériau polycristallin : (a) structure hexagonale compacte (HCP) avec deux plans de glissement (0001) et (10 $\bar{1}$ 0); (b) figures de pôles donnant la densité des deux orientations dans la texture.

Chaque cristal contient différents plans de glissement et la texture d'un matériau peut être illustrée par des figures de pôles (Figure 2b). Nous ne nous intéressons ici qu'à un seul plan de glissement à la fois. Considérons le plan de glissement (0001) illustré en Figure 2a, déterminé par le vecteur \mathbf{n} , unitaire et normal à ce plan, représenté en rouge. On peut noter que \mathbf{n} est attaché à un cristal, mais que chaque cristal du matériau a sa propre orientation et donc que l'orientation de \mathbf{n} varie d'un cristal à un autre.

Sachant que chaque triplet d'angles d'Euler conduit à une matrice de rotation $\mathbf{R}_{(3 \times 3)}$, on peut appliquer cette rotation au vecteur \mathbf{n} définissant le plan de glissement pour déterminer un vecteur unitaire \mathbf{n}' fournissant l'orientation du plan de glissement dans le repère de l'échantillon.

$$\mathbf{n}' = \mathbf{R}\mathbf{n} = \langle x, y, z \rangle^T. \quad (2)$$

En appliquant tous les N triplets d'angles d'Euler au vecteur \mathbf{n} , \mathcal{T} s'écrit

$$\mathcal{T}_{xyz}(\mathbf{n}) = [\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{d}], \quad x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 = 1, \quad i = 1 \dots N. \quad (3)$$

\mathbf{n} étant un vecteur unitaire, tous les triplets de $\langle x, y, z \rangle^T$ correspondent à des points sur la surface d'une sphère unitaire. La position de chaque point sur cette sphère peut se définir par un angle d'azimut et un angle d'élévation,

$$\mathcal{T}_{ae}(\mathbf{n}) = [azi, ele, d]. \quad (4)$$

En associant des couleurs aux densités fournies dans le fichier ODF, il est possible de colorier la sphère unitaire. Des projections stéréographiques permettent ensuite de tracer des figures de pôles, telles qu'illustrées sur la Figure 2b.

La texture évolue à tout instant d'une sollicitation et a une forte influence sur la réponse du matériau [1]. Pour un état de sollicitation donné, il est donc essentiel de bien prédire la texture à partir des données issues de caractérisations expérimentales pour d'autres états de sollicitation. Pour prendre en compte les informations de texture disponibles dans des simulations pilotées par les données, il est nécessaire dans un premier temps de réduire la dimensionnalité des données de texture. En effet, s'agissant généralement de figures de pôle, même pour une faible quantité d'images, la dimension des données à traiter peut rapidement devenir prohibitive. Des difficultés supplémentaires portent sur la gestion de l'hétérogénéité des données contenues dans un fichier ODF, mixant des données angulaires périodiques et des densités.

3 ACP et construction d'une variété de textures admissibles

Nous considérons le vecteur de densité \mathbf{d} de chaque texture $\{\mathcal{T}^{(i)}, i = 1, 2, 3, \dots, M\}$ comme un "cliché", synonyme d'échantillon dans le contexte d'ACP. On utilise ce mot parce que l'ACP est souvent utilisée pour une série d'échantillons prélevés pendant une évolution continue, comme une série de clichés pris pour un objet bougeant.

Les M clichés $\{\mathbf{d}^{(i)}, i = 1, 2, 3, \dots, M\}$ sont stockés dans la matrice \mathbf{D} de dimension $N \times M$.

$$\mathbf{D} = [\mathbf{d}^{(1)}, \mathbf{d}^{(2)}, \mathbf{d}^{(3)}, \dots, \mathbf{d}^{(M)}]. \quad (5)$$

L'utilisation de l'ACP sur ces M données de dimension n permet d'en extraire au plus $\min(M, N)$ modes [5]. Tout cliché $\mathbf{d}^{(i)}$ peut être exprimé ensuite comme une combinaison linéaire des modes. En effectuant une reconstruction avec $m \ll M$ modes, il est généralement possible de reproduire de façon très précise les clichés initiaux.

On procède par la décomposition SVD (Singular Value Decomposition),

$$\mathbf{D} = \mathbf{\Phi} \mathbf{\Sigma} \mathbf{\Psi}^T, \quad (6)$$

où $\mathbf{\Phi}$ et $\mathbf{\Psi}$ sont 2 matrices orthonormées dans lesquelles les colonnes sont respectivement les vecteurs propres de $\mathbf{D}\mathbf{D}^T$ et $\mathbf{D}^T\mathbf{D}$. $\mathbf{\Sigma}$ est une matrice diagonale dont les termes non-nuls sont les valeurs singulières, correspondant à la racine des valeurs propres de $\mathbf{D}\mathbf{D}^T$.

On retient ensuite les m premiers modes, avec $m \leq \min(M, N)$, dans la matrice des vecteurs singuliers gauche,

$$\mathbf{\Phi}_{,m} = [\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_m]. \quad (7)$$

Un cliché peut être reconstruit par une combinaison linéaire des modes retenus,

$$\tilde{\mathbf{d}}^{(j)} = \sum_{i=1}^m \phi_i \alpha_i^{(j)}, \quad (8)$$

avec les coefficients $\alpha_i^{(j)}$ donnés par la projection du cliché j sur le i -ème vecteur de la base $\mathbf{\Phi}$,

$$\alpha_i^{(j)} = \mathbf{d}^{(j)T} \phi_i, \quad i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, M. \quad (9)$$

En utilisant la SVD sur les densités des figures de pôles, il est ainsi possible de réduire la dimensionnalité de N à m . L'ordre de troncature m est choisi de façon à respecter l'erreur de reconstruction de \mathbf{D} . Puis, dans l'espace réduit α , il est possible d'interpoler une variété [5] dont on pourra estimer la dimensionnalité intrinsèque et qui permettra d'interpoler des textures admissibles,

$$\mathcal{M}(\alpha) = 0. \quad (10)$$

Cependant, il y a trois difficultés à traiter.

1. L'écriture de la matrice des clichés (5) suppose que tous les clichés sont de même taille. Lorsque les tailles des clichés ne sont pas les mêmes, il n'est pas possible de construire la matrice des clichés D .
2. Même en considérant que les tailles des clichés soient les mêmes, il est possible que les densités y soient données sur des nuages d'angles d'Euler différents. Dans ce cas, il n'est mathématiquement pas pertinent d'utiliser l'ACP. En effet, combinant des données angulaires et de densité, celle-ci n'aurait pas de sens physique.
3. Les données étant exprimées sous la forme d'angles, il est nécessaire de prendre en compte la périodicité.

Notre solution est donc de traiter les données de texture de chaque cliché au moyen de la régression par processus gaussien (krigeage) pour interpoler les textures sur une grille neutre commune, en construisant un noyau adapté.

4 Processus gaussien : préparation des fichiers de texture

La régression par processus gaussien est une méthode statistique permettant l'interpolation de données. L'idée est, ici, d'interpoler des densités définies, dans différentes textures sur une grille neutre commune d'angles azimut et élévation avec

$$d_* = \mathbf{c}_*^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{d}, \quad (11)$$

où \mathbf{d} correspond à un jeu de densités observées, et d_* à la densité interpolée sur un des N_{ref} points de la grille neutre. Pour un cliché de taille N , la matrice \mathbf{C} et le vecteur \mathbf{c}' sont définis tels que

$$C_{ij} = k(\varphi_i, \varphi_j) + \delta_{ij} \sigma_n^2 \quad i, j = 1, \dots, N; \quad (12)$$

$$\mathbf{c}_* = \langle k(\varphi_*, \varphi_1), k(\varphi_*, \varphi_2), \dots, k(\varphi_*, \varphi_N) \rangle^T. \quad (13)$$

$\varphi_i, i = 1 \dots N$, est un vecteur fournissant, sur une sphère unitaire, les angles d'azimut et d'élévation associés à un point i . δ_{ij} est le delta de Kronecker. φ_* est un vecteur fournissant, sur une sphère unitaire, les angles azimut et élévation associés au point de la grille neutre. σ_n est la variance de bruit et $k(\varphi_i, \varphi_j)$ est une fonction noyau, par exemple le noyau gaussien,

$$k(\varphi_i, \varphi_j) = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{dist(\varphi_i, \varphi_j)^2}{\theta^2}\right), \quad (14)$$

où θ (l'échelle de longueur), σ_f (la variance de signal) et σ_n sont les hyperparamètres à optimiser.

La fonction $dist(\varphi_i, \varphi_j)$ correspond à la distance entre φ_i et φ_j . S'agissant dans notre cas d'une distance entre positions données par des angles, qui sont des données périodiques, nous pourrions utiliser un noyau périodique. Toutefois, pour plus de généralité, nous proposons l'utilisation d'une distance périodique définie par la relation :

$$dist(\varphi_i, \varphi_j) = \cos^{-1} \left(\langle x_i, y_i, z_i \rangle^T \cdot \langle x_j, y_j, z_j \rangle^T \right) \quad (15)$$

où $\langle x_i, y_i, z_i \rangle^T$ et $\langle x_j, y_j, z_j \rangle^T$ (voir Equation (3)) sont les normales à la sphère unitaire associées aux positions données par les vecteurs φ_i et φ_j .

Enfin, l'identification des hyperparamètres θ, σ_f et σ_n est réalisée en comparant entre la validation croisée et la maximisation de la vraisemblance.

5 Application à un cas académique

Nous proposons trois ensembles de données assimilées à des figures de pôles. Un ensemble de données correspond aux positions d'une série de points sur la surface d'une sphère unitaire. Toute position est donnée par un angle azimut et un angle élévation, et à chaque couple azimut-élévation correspond un

scalaire pouvant être représenté par une couleur. Ce scalaire peut être assimilé au concept de densité de texture d'un plan de glissement.

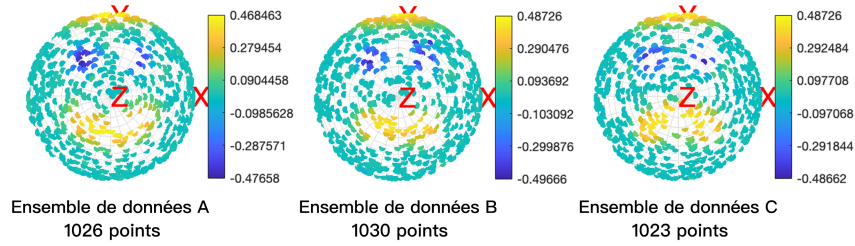


FIGURE 3 – Trois ensembles de données fabriqués

La Figure 3 fournit la projection sur $\mathbf{n} = \langle 0, 0, 1 \rangle^T$ correspondant à des ODF de 1026, 1030 et 1023 lignes pour les exemples A, B et C. Pour chaque position/ligne, l'information de la densité est associée à 2 angles.

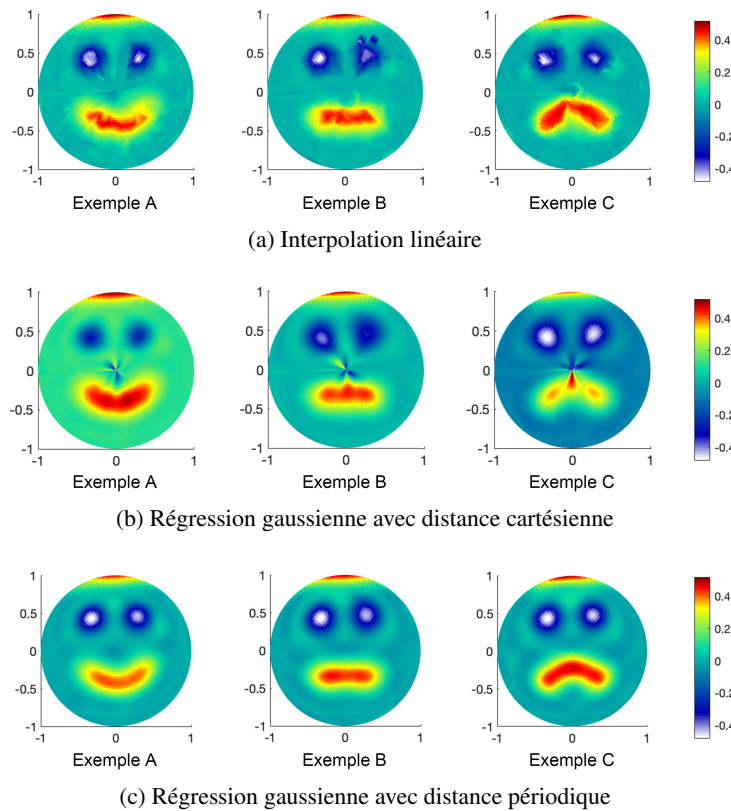


FIGURE 4 – Comparaison des méthodes d'interpolation

La première étape consiste à interpoler les clichés disponibles sur une grille neutre. On utilise d'abord une interpolation linéaire. Dans ce cas, les résultats présentent systématiquement des discontinuités (Figure 4a). L'interpolation avec le processus gaussien est donc préférée pour obtenir un meilleur lissage (Equation (11)). En réalisant cette opération **sans** prendre en compte la périodicité des données angulaires (Equation (15)) au moyen d'une fonction distance cartésienne, on note toujours des distorsions (Figure 4b), alors que les résultats obtenus avec la distance périodique (Equation (15)) correspondent bien à des figures de pôles lisses et régulières (Figure 4c).

Il est maintenant possible de passer à l'étape de réduction de dimensionnalité grâce à la SVD, telle que décrite en Section 3.

La matrice de clichés interpolés est représentée par D_* . Il est à noter qu'en pratique, les clichés sont au préalable centrés en leur soustrayant la moyenne. C'est donc sur D'_* au lieu de D_* que la décompo-

sition par la SVD est réalisée,

$$D'_* = [d_*^{(1)} - \bar{d}_*, d_*^{(2)} - \bar{d}_*, d_*^{(3)} - \bar{d}_*, \dots, d_*^{(M)} - \bar{d}_*], \quad (16)$$

$$\bar{d}_* = \frac{1}{M} \sum_i d_*^{(i)}. \quad (17)$$

La matrice D'_* est construite avec les 3 vecteurs de densités interpolées grâce au processus gaussien. La grille neutre étant constituée de 10 000 points, la dimension de la matrice D'_* est donc de 10000×3 .

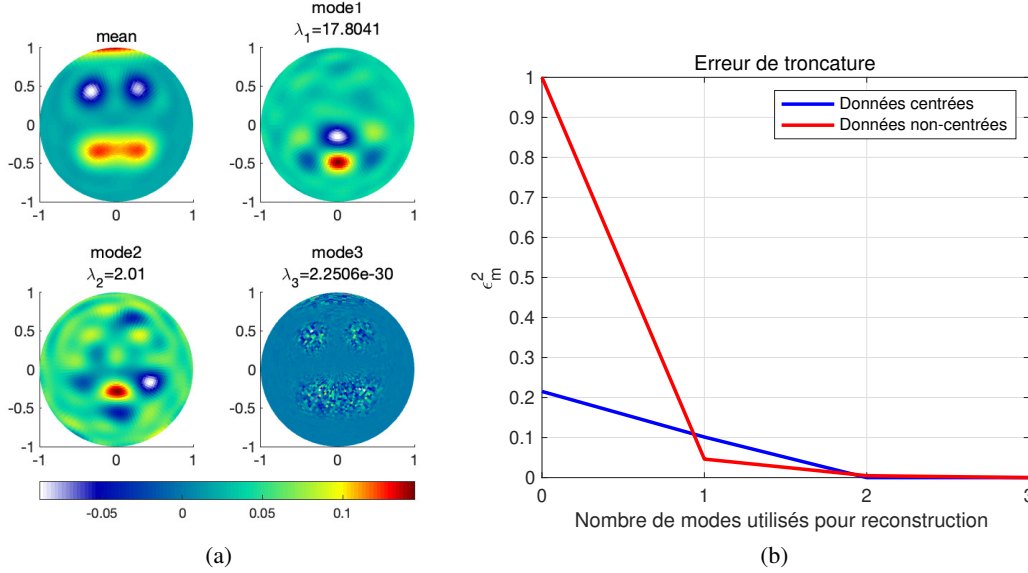


FIGURE 5 – (a) Moyenne et trois modes (b) Erreur de reconstruction en fonction du nombre de modes

La Figure 5a illustre le cliché moyen et les 3 modes obtenus par la SVD. L'évolution de l'erreur de reconstruction, Figure 5b, montre bien que 2 modes sont suffisants pour reproduire, sans erreur de reconstruction, les 3 clichés initialement utilisés. En Figure 6, on peut effectivement observer que les images obtenues par la reconstruction avec 2 modes sont similaires aux images issues du processus gaussien.

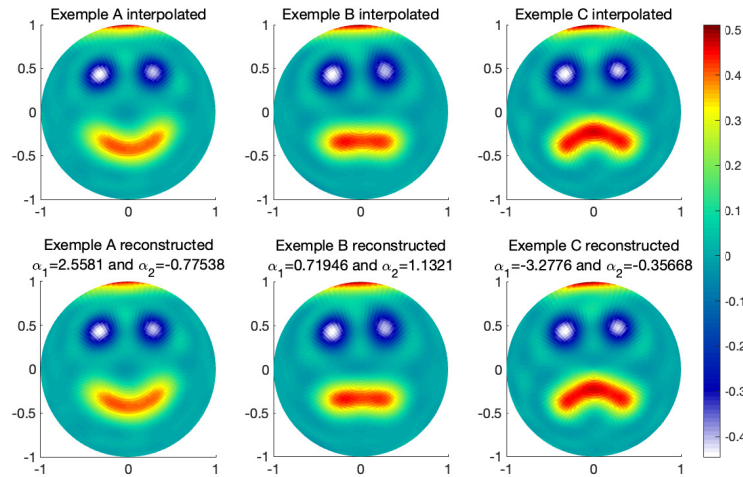


FIGURE 6 – Reconstruction des 3 figures de pôles avec 2 modes.

Finalement, en ne considérant que ces 2 modes, une variété de textures admissibles, illustrée en Figure 7, peut être interpolée (Equation (10)), en considérant ici la méthode des moindres carrés. On note que la variété a une dimension intrinsèque de 1, permettant de prédire l'évolution de la figure de pôle entre chacun des 3 clichés d'apprentissage avec un seul paramètre. Une figure de pôle correspondant à un point non admissible dans l'espace α est également illustrée.

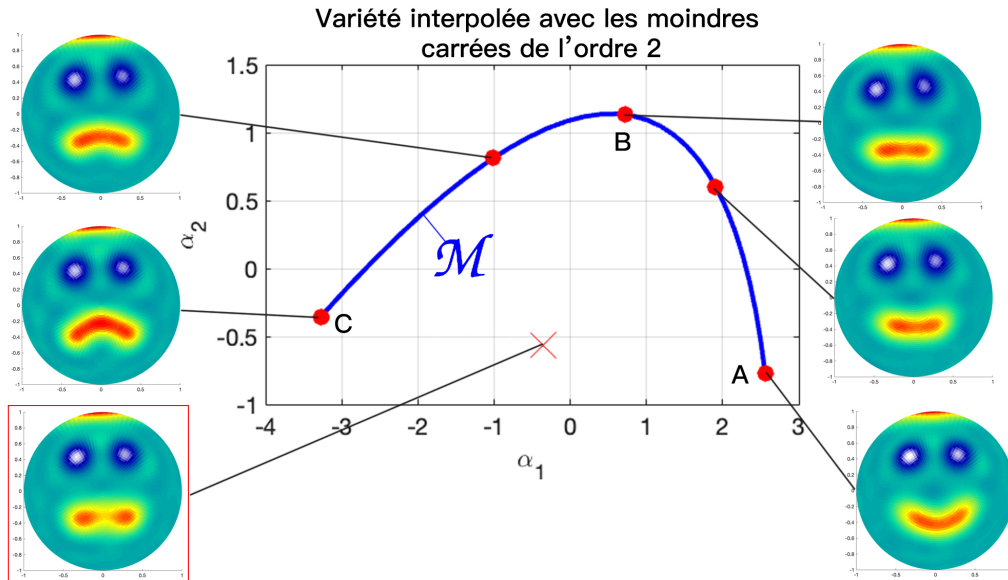


FIGURE 7 – Interpolation sur la variété et interpolation cartésienne

6 Conclusion

Dans ce résumé nous introduisons la méthodologie et nous l'illustrons sur un cas académique. Lors de la conférence, en plus de ce cas académique, seront également exposés des résultats obtenus en considérant l'évolution, au cours d'une sollicitation mécanique, de la texture d'un matériau métallique polycristallin.

Références

- [1] 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.
- [2] Jianqiang Jin, Ludovic Cauvin, Balaji Raghavan, Piotr Breitkopf, Salima Bouvier. Vers un paradigme d'apprentissage de variété pour la caractérisation de l'anisotropie plastique dans des métaux et des alliages métalliques. *15ème colloque national en calcul des structures*, May 2022, 83400 Hyères-les-Palmiers, France.
- [3] Xia L., Raghavan B., Breitkopf P., Zhang W. Numerical material representation using proper orthogonal decomposition and diffuse approximation. *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 224, pp. 450-462, 2013.
- [4] Wang Xiaodong. Multi-scale characterization and modeling of highly anisotropic Zinc based alloys for forming process simulation. *Thèse de doctorat, Université de Technologie de Compiègne*, 2017.
- [5] Meng L., Breitkopf P., Le Quilliec G, Raghavan B, Villon P. Nonlinear Shape-Manifold Learning Approach : Concepts, Tools and Applications. *Arch Computat Methods Eng*, Vol. 25, pp. 1-21, 2018.