

Champs locaux, effets de joints de grains et de surface dans les agrégats polycristallins 3D

Yoann Guilhem, Stéphanie Basseville, Francois Curtit, Jean-Michel Stephan, Georges Cailletaud

▶ **To cite this version:**

Yoann Guilhem, Stéphanie Basseville, Francois Curtit, Jean-Michel Stephan, Georges Cailletaud. Champs locaux, effets de joints de grains et de surface dans les agrégats polycristallins 3D. CSMA 2013 - 11ème colloque national en calcul des structures, May 2013, Giens, France. 8 p. hal-00868423

HAL Id: hal-00868423

https://minesparis-psl.hal.science/hal-00868423

Submitted on 1 Oct 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

CSMA 2013
11e Colloque National en Calcul des Structures
13-17 Mai 2013

Champs locaux, effets de joints de grains et de surface dans les agrégats polycristallins 3D

Yoann GUILHEM [1], Stéphanie BASSEVILLE [2], François CURTIT [3], Jean-Michel STÉPHAN[4], Georges CAILLETAUD [5]

[1] MINES ParisTech, Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633, yoann.guilhem@esrf.fr
[2] Université de Versailles, LISV, stephanie.basseville@uvsq.fr
[3] EDF R&D, Mécanique Matériaux et Composants, francois.curtit@edf.fr
[4] EDF R&D, Mécanique Matériaux et Composants, jean-michel.stephan@edf.fr
[5] MINES ParisTech, Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633, georges.cailletaud@mines-paristech.fr

Résumé — Cet article présente une étude numérique des champs mécaniques locaux dans les polycristaux afin de traiter le phénomène de fissures courtes de fatigue. Une série de calculs par éléments finis en 3D d'agrégats polycristallins de structure CFC permet de caractériser les effets de surface et de joints de grains sous chargement cyclique. L'analyse des résultats fournit de précieuses indications pour le développement de modèles d'amorçage de fissure.
Mots clés — Éléments finis, plasticité cristalline, localisation de déformation, chargements cycliques, effet de surface, joints de grains

1 Introduction

Le phénomène de fatigue apparaît dans les composants mécaniques assujettis à des déformations cycliques. Dans la majeure partie des cas, la mécanique linéaire de la rupture suffit à prédire la durée de vie de ces pièces. Cependant, sous conditions de fatigue à grands nombres de cycles (HCF), et dans le cas de matériaux de type alliage, composés de polycristaux, on observe la formation de fissures courtes de fatigue. Ces fissures, dont la longueur est de l'ordre de quelques grains, présentent des vitesses de propagation que la loi de Paris ne peut prédire dans les premiers stades d'évolution. La période d'incubation, comprenant l'amorçage et la micropropagation peut représenter de 50 % à 80 % de la durée de vie totale de la pièce [1]. Une forte dépendance vis-à-vis de la microstructure est aussi observée. L'orientation des grains et les singularités microstructurales telles que les joints de grains affectent sensiblement l'évolution de ces fissures. On constate régulièrement un ralentissement à l'approche des joints de grains. La multitude de configurations de formes de grains, d'orientations et de désorientations aux joints de grains entraîne une forte dispersion des résultats d'essai de fatigue HCF. Une meilleure compréhension de l'influence de ces paramètres permettra d'affiner les modèles de prédiction de durée de vie.

Cet aspect a tout d'abord été traité par des observations expérimentales, démontrant la formation, sous chargements cycliques de bandes de glissements persistantes (PSB), où se concentre la déformation plastique. Ce phénomène s'explique par un modèle physique basé sur les mouvements de dislocations [2] Les intrusions et extrusions formées par ces bandes à la surface des polycristaux, appelées traces de glissements persistantes (PSM), représentent des sites d'amorçage préférentiels pour les fissures courtes [3]. Par l'intermédiaire du microscope à force atomique (AFM), il devient possible d'acquérir une cartographie du relief de surface engendré par ces extrusions [4]. En alliant cette technique à l'EBSD, on peut étudier le mécanisme de formation des traces de glissement en surface. Cependant le problème des fissures courtes est avant tout un problème tridimensionnel, qui requiert donc une information en volume. La microstructure 3D (forme et orientation des grains) est accessible grâce aux techniques d'imagerie 3D non destructrices, comme la tomographie par contraste de diffraction (DCT). Les travaux de Herbig *et al.* ont montré la corrélation entre le trajet de fissuration et la microstructure d'un alliage de Titane [5].

D'un point de vue numérique, l'avantage est de pouvoir recréer et analyser tout type de configurations d'orientations locales. On peut modéliser ce problème par deux outils, la Dynamique Discrète des Dislocations (DDD) et la méthode des Élément Finis (EF). Dans le premier cas, on se restreint géné-

ralement à l'étude d'un seul grain, mais avec une discrétisation suffisante pour reproduire les PSM [6]. Néanmoins, les interactions mécaniques entre grains et les déviations du champs de contraintes local qui en découlent ne peuvent être prises en compte par ce type de modélisation. Dans le second cas, les calculs EF apportent la connaissance des champs locaux dans un agrégat polycristallin de quelques centaines de grains en rendant compte des hétérogénéités du champs de contraintes local. C'est cette approche qui est choisie. Elle a déjà permis, sans introduire de plasticité cristalline de mettre en évidence l'effet de surface libre [7]. L'introduction d'une loi cristalline, avec un modèle 2D simple a mis en lumière l'effet de « cluster » dans les polycristaux [8]. L'apport de la simulation en 3D se caractérise par une meilleure représentativité des mécanismes de déformation ainsi que par la possibilité d'étudier les champs locaux dans tout le volume et non seulement en surface [9, 10]. Cet article s'intéresse donc à la localisation de la déformation en surface et à cœur, à l'effet de surface et à la formation des PSM, et ce dans différentes conditions de chargement.

2 Stratégie de modélisation

2.1 Modèle de comportement

Le modèle de plasticité cristalline de Méric-Cailletaud [11], implémenté dans le code Éléments Finis Z-set, est utilisé comme loi de comportement locale de chaque grain, sous hypothèse de petites perturbations. Chaque grain est donc défini par un groupe d'éléments ainsi qu'une orientation du réseau cristallin, qui est définie aléatoirement. Le champs de déplacement est continu aux joints de grains, ce qui y engendre des discontinuités dans le champs de contrainte. L'évolution de la déformation totale $\underline{\underline{\varepsilon}}$ se décompose en partie élastique $\underline{\underline{\varepsilon}}^e$ et plastique $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$.

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}} = \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^e + \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p = \underline{\underline{\underline{\underline{C}}}}^{-1} : \dot{\underline{\underline{\sigma}}} + \dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p \tag{1}$$

Le critère de plasticité est défini sur chaque système de glissement s par la cission résolue τ^s, calculée à partir du tenseur de contraintes locales et du tenseur de Schmid $\underline{\underline{m}}^s$, lui-même défini par la normale au plan de glissement $\underline{n}^s$ et la direction de glissement $\underline{l}^s$. L'étude portant sur l'acier inoxydable austénitique 316L, seule la famille de système de glissement octaédrale est considérée, caractérisée par les plans $\{1\ 1\ 1\}$ et directions $\langle 1\ 1\ 0 \rangle$.

$$\tau^s = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m}}^s \tag{2}$$

$$\text{avec} \quad \underline{\underline{m}}^s = \frac{1}{2}\left(\underline{l}^s \otimes \underline{n}^s + \underline{n}^s \otimes \underline{l}^s\right) \tag{3}$$

La loi d'écoulement fait intervenir la cission résolue τ^s de chaque système de glissement ainsi qu'un terme d'écrouissage cinématique x^s et isotrope r^s. La vitesse de glissement $\dot{v}^s$ est déterminée par une loi de type Norton, paramétrée par les coefficients de viscosité K et n. Les contributions de chaque système sont sommées pour donner la déformation plastique $\underline{\underline{\varepsilon}}^p$.

$$\dot{\underline{\underline{\varepsilon}}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\underline{m}}^s \tag{4}$$

$$\dot{\gamma}^s = \text{sign}(\tau^s - x^s)\dot{v}^s \tag{5}$$

$$\dot{v}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s - \tau_0}{K} \right\rangle^n \tag{6}$$

où γ^s est le glissement sur le système s et τ_0 est la cission résolue critique.

Les lois d'évolution des écrouissages cinématique et isotrope sont de type non linéaire à saturation. Les interactions entre systèmes de glissement sont retranscrites dans l'écrouissage isotrope par l'intermédiaire de la matrice h.

$$x^s = c\alpha^s \tag{7}$$

$$r^s = bQ\sum_r h_{sr}\rho^r \tag{8}$$

$$\dot{\alpha}^s = \left(\text{sign}(\tau^s - x^s) - d\alpha^s\right)\dot{v}^s \tag{9}$$

$$\dot{\rho}^s = (1 - b\rho^s)\dot{v}^s \tag{10}$$

Loi	Loi d'écoulement							Matrice d'interaction					
Paramètre	τ_0	K	n	Q	b	c	d	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6
Valeur	40	12	11	10	3	40 000	1 500	1	1	0,6	12,3	1,6	1,3
Unité	MPa	MPa.s^{-n}	/	MPa	/	MPa	/	/	/	/	/	/	/

Tableau 1 – Paramètres matériau de la loi cristalline identifiés pour l'acier 316L.

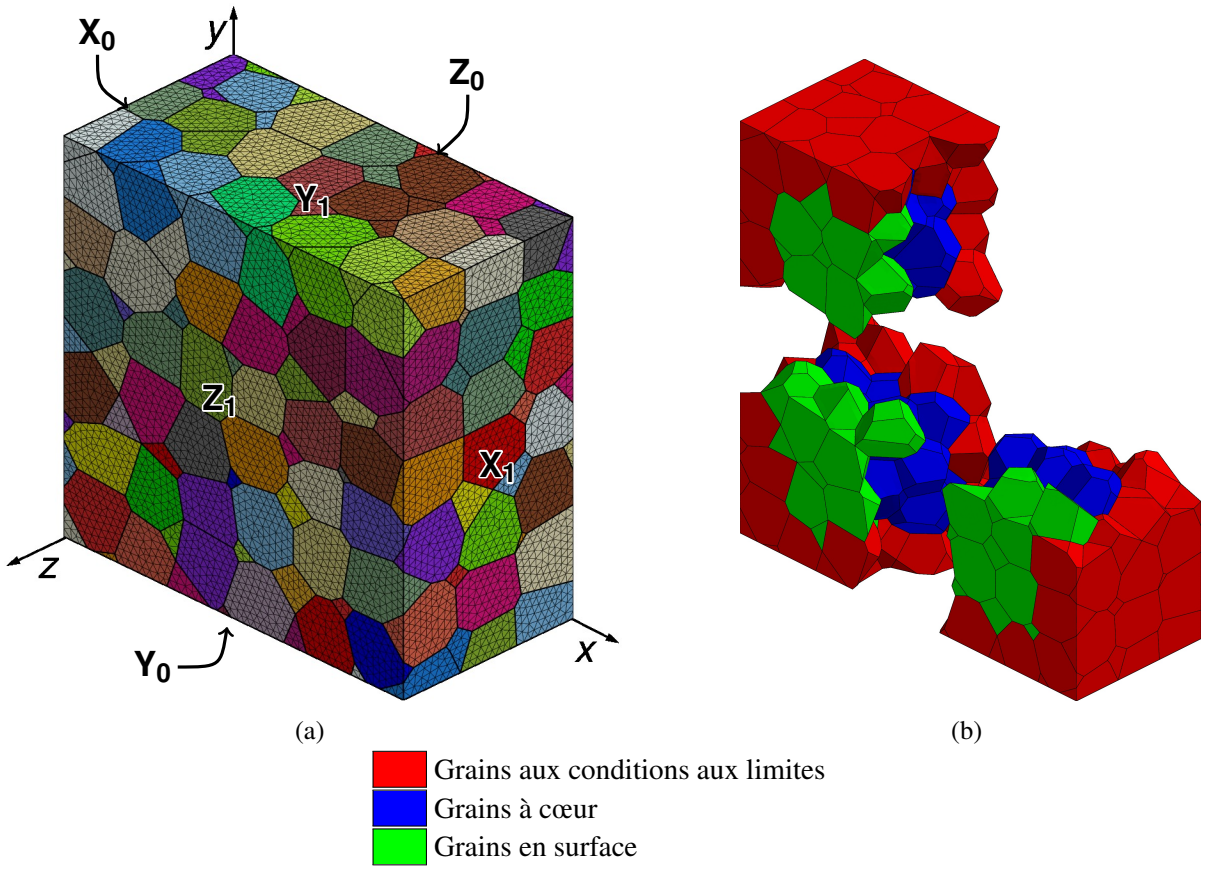


Fig. 1 – (a) Maillage fin de l'agrégat polycristallin synthétique étudié avec définition des faces utilisées pour les conditions aux limites. (b) Vue éclatée des grains aux conditions aux limites, à cœur et en surface.

où c/d et d sont la capacité et la vitesse d'écrouissage cinématique, Q et b la capacité et la vitesse d'écrouissage isotrope. L'ensemble des paramètres matériau a été identifié sur des données d'essais cycliques sur l'acier 316L [10]. Il sont répertoriés dans le tableau 1.

2.2 Maillages et conditions aux limites

La microstructure étudiée a été générée de manière synthétique, par tesselation de Voronoï. Il s'agit d'un agrégat constitué de 291 grains, dont les dimensions sont 250 µm × 250 µm × 125 µm, soit une taille de grain d'environ 50 µm. Trois maillages de cette microstructure sont proposés correspondant, à différentes densités de maillage afin de rendre compte de l'importance du choix de la taille de maille dans le cadre de calculs EF de polycristaux. Tous sont réalisés avec des éléments tétraédriques quadratiques qui suivent les joints de grains et évitent ainsi les joints de grains « en escalier » obtenus avec les maillages réglés. Concernant les maillages les plus fins, les calculs sont effectués en parallèle, à l'aide la méthode de décomposition de domaines FETI [12].

Quatre chargements cycliques sont considérés dans cette étude, deux de type uniaxial et deux de type équibiaxial. Pour chacun d'eux, des conditions de symétrie sont appliquées sur les faces cachées X_0, Y_0 et Z_0 et la surface Z_1 est libre de contrainte (cf. figure 1a). Les conditions aux limites relatives à chacun d'eux sont décrites comme suit :

Maillage	Éléments	Nœuds	Degrés de liberté	Sous-domaines	Temps CPU [h]
coarse	16 099	23 499	70 497	1	3
medium	65 170	92 341	277 530	4	20
fine	454 673	626 899	1 880 697	20	52

Tableau 2 – Caractéristiques principales des 3 maillages étudiés.

(a) uniaxial-x
- Face X_1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{xx} = \pm 0,2$ %
- Face Y_1 : déplacement normal homogène réglé par `mpc`

(b) uniaxial-y
- Face X_1 : déplacement normal homogène réglé par `mpc`
- Face Y_1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{yy} = \pm 0,2$ %

(c) biaxial-eq
- Face X_1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{xx} = \pm 0,14$ %
- Face Y_1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{yy} = \pm 0,14$ %

(d) biaxial
- Face X_1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{xx} = \pm 0,2$ %
- Face Y_1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\varepsilon_{yy} = \pm 0,2$ %

Le niveau de sollicitation du chargement biaxial-eq est fixé pour donner une déformation équivalente au sens de von Mises égale à celle des cas uniaxiaux, *i.e.* $\varepsilon_{mises} = \pm\frac{2}{3}(1+\nu) \times 0,2$ %.

Chaque calcul est effectué pour 2 cycles de fatigue, avec le même jeu d'orientation. Seuls la densité de maille et le chargement changent.

3 Résultats et discussion

3.1 Influence de la densité de maillage

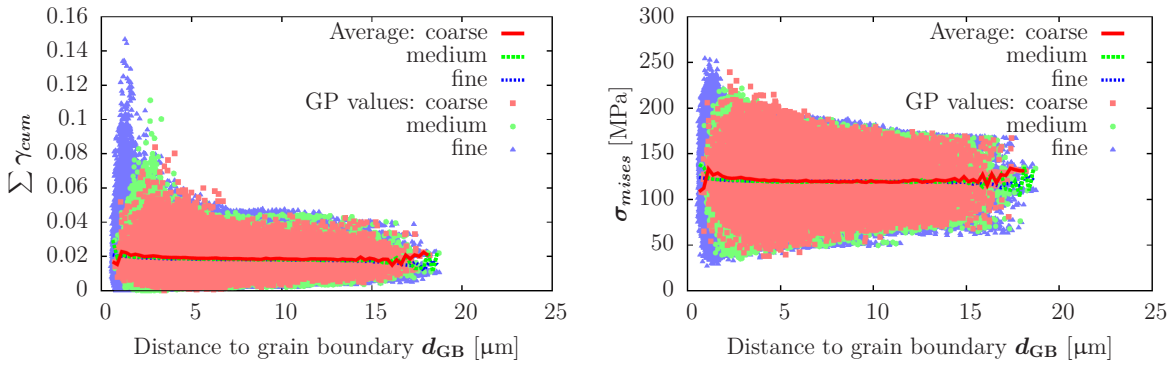
Un calcul avec le chargement uniaxial-y a été effectué avec les 3 densités de maillage présentées précédemment. La figure 2 montre la déformation plastique $\sum\gamma_{cum}$ et la contrainte de von Mises σ_{mises} aux points de Gauss en fonction de la distance aux joints de grain d_{surf}. Malgré une valeur moyenne homogène en fonction de d_{surf}, on observe une forte dispersion des valeurs aux abords des joints de grain, qu'il est difficile de reproduire avec de faibles densités de maillage. Cela implique d'utiliser, dans le cadre d'études comparatives ou statistiques, une taille de maille homogène dans l'agrégat et assez fine (de l'ordre de 1 000 éléments par grains). Les sites critiques semblent donc se situer près des joints de grains, là où les incompatibilités de déformations apparaissent. Pour le reste de l'étude, les calculs seront donc effectués sur le maillage le plus fin.

3.2 Analyse des champs locaux en surface

La figure 3 et présente les cartes de la somme des glissements cumulés $\sum\gamma_{cum}$ en surface libre de l'agrégat. En uniaxial, la déformation plastique s'organise sous forme de bandes de localisation orientées à 45° par rapport au chargement (figures 3a et 3b) alors qu'en biaxial cela semble plus diffus (figures 3c et 3d). Ces bandes traversent parfois un grain entier. Cependant, dans tous les cas, c'est au niveau des joints de grains et des points triples que la localisation est la plus forte. Concernant l'intensité de la déformation plastique, elle est plus élevée en biaxial, même avec une déformation équivalente imposée similaire (figure 3c). On remarque également que le champs de déformation en biaxial ne correspond pas à une simple somme des chargements uniaxiaux.

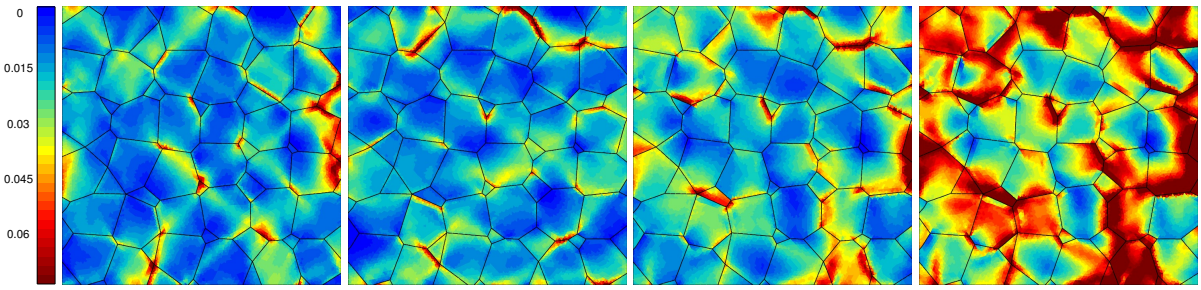
3.3 Analyse des champs locaux en volume

Un aperçu de l'organisation spatiale de la localisation de la déformation plastique dans le volume de l'agrégat est donnée par la figure 4. Il s'agit des vues dans les trois directions de l'espace des isovaleurs



(a) (b)

Fig. 2 – Déformation plastique $\sum\gamma_{cum}$ et de contrainte de von Mises σ_{mises} en fonction de la distance aux joints de grains pour différents densité de maillage. Sont tracées à la fois les valeurs discrètes aux points de Gauss (points en couleurs claires) et la moyenne par tranche (en courbes foncées).



(a) Uniaxial-x (b) Uniaxial-y (c) Biaxial-eq (d) Biaxial

Fig. 3 – Carte de la somme des glissements cumulés $\sum\gamma_{cum}$ en surface libre sous différents chargements.

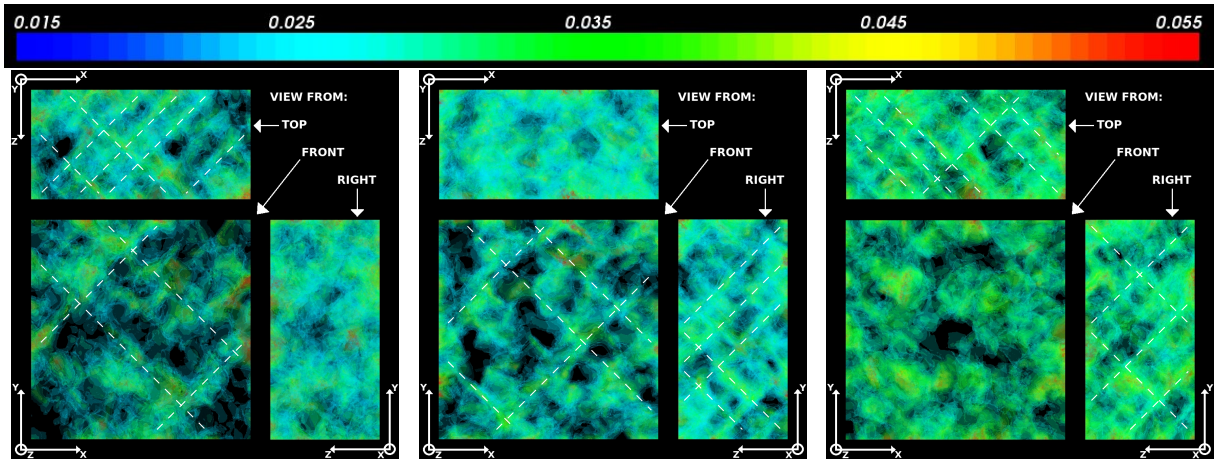
de $\sum\gamma_{cum}$ visualisées par transparence via le logiciel Salome [13]. On y voit apparaître des bandes de localisations à 45° qui suivent des schémas différents suivant le type de chargement, comme Miller l'avait précédemment présenté avec le principe des facettes de type A et B [1]. Les facettes de type B sont plus nocive car elles impliquent une émergence de la matière au travers de la surface, ce qui est plus propice à l'amorçage et à la propagation de fissures.

Sous chargement uniaxial, les bandes sont présentes dans les vues suivant la direction orthogonale au chargement et à la normale à la surface libre (y pour le cas uniaxial-x, x pour le cas uniaxial-y) et suivant la direction de surface libre, z (cf. figure 4a et 4b). Cela correspond à un mélange entre facettes de type A et B. Sous chargement biaxial, les bandes de localisations sont visibles dans les directions x et y, ce qui correspond uniquement à des facettes de type B (figure 4c). Ces motifs de localisation concordent avec les observations expérimentales. De par l'organisation spatiale de la déformation plastique résultante, les chargements équibiaxiaux sont plus nocifs.

3.4 Sites d'amorçages de fissures

Nous proposons un indicateur sur les marches d'intrusion et extrusion de surface, noté $\underline{\gamma}_{\text{surf}}$, rendant compte à la fois de l'intensité et de l'orientation. Le principe de ce dernier est de sommer les contributions plastiques de tous les systèmes associés à un plan de glissement, et les projeter sur la normale à la surface libre $\underline{n}_{\text{surf}}$. Pour chaque plan de glissement p, et les systèmes de glissement associés s, la norme de ce vecteur est :

$$\gamma^{p}_{\text{surf}} = \left(\sum_{s \in p} \gamma^{s} \underline{l}^{s} \right) \cdot \underline{n}_{\text{surf}} \tag{11}$$



(a) Uniaxial-x (b) Uniaxial-y (c) Biaxial-eq

Fig. 4 – Vues en transparence des isosurfaces de $\sum \gamma_{cum}$ dans les 3 directions de l'espace, pour différents cas de chargements.

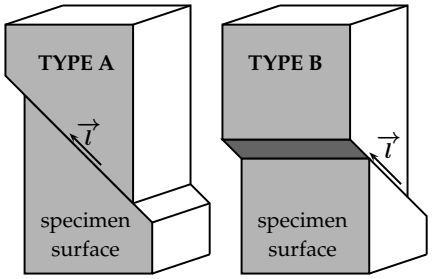


Fig. 5 – Facettes de type A et B, selon Miller [1].

La valeur maximale de ces contributions par plan, notée γ_{surf} est stockée avec le vecteur trace du plan sur la surface $\underline{l}_{\text{surf}}$

$$\gamma_{\text{surf}} = \max_{p} \left(|\gamma^{p}_{\text{surf}}| \right) \times \text{sign}(\gamma^{p}_{\text{surf}}) \tag{12}$$

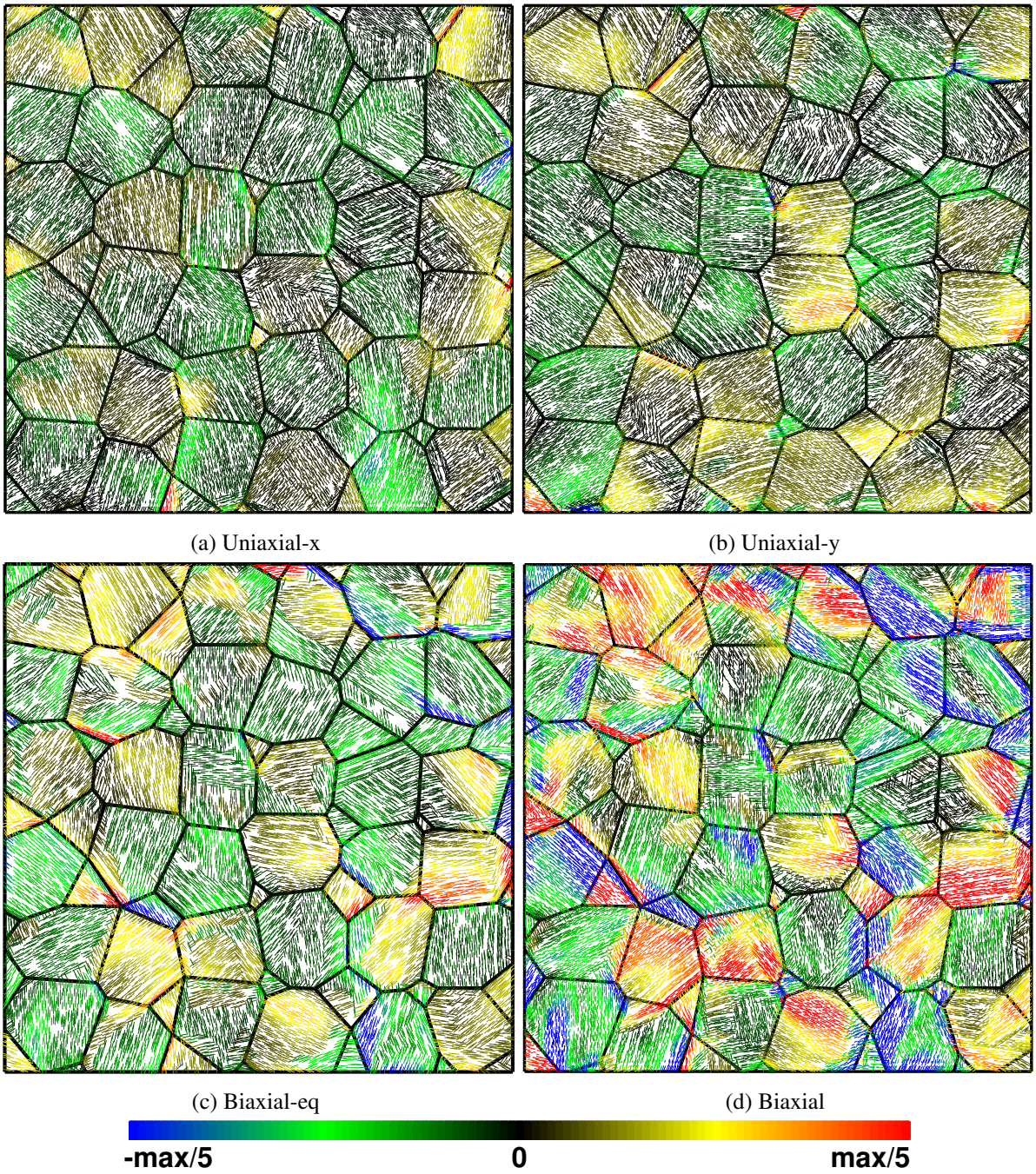
$$\underline{l}_{\text{surf}} = \frac{\underline{n}_{\text{surf}} \times \underline{n}(\gamma_{\text{surf}})}{|\underline{n}_{\text{surf}} \times \underline{n}(\gamma_{\text{surf}})|} \tag{13}$$

$$\underline{\gamma}_{\text{surf}} = \gamma_{\text{surf}} \, \underline{l}_{\text{surf}} \tag{14}$$

La figure 6 présente les cartes de l'indicateur $\underline{\gamma}_{\text{surf}}$. L'allure des traces de glissement suit les tendances observées expérimentalement. Sous chargement uniaxial, la majeure partie des grains ne donne des traces que pour un plan, parfois deux dans de rares cas. Les traces sont généralement perpendiculaires ou orientées à 45° par rapport à la direction de chargement, ce qui suit encore le schéma des facettes de type A et B. En biaxial, plus de plans sont activés, et ce avec une intensité accrue. Ici encore, la nocivité des chargements biaxiaux est démontrée. On remarque que dans tous les cas, les valeurs critiques se localisent près des joints de grains. Néanmoins, bien que cet amorçage soit prédit aux abords des joints de grains, il n'est pas forcément intergranulaire.

4 Conclusion et perspectives

Une modélisation numérique tridimensionnelle basée sur modèle de plasticité cristalline a été utilisé pour traiter le problème de localisation des champs locaux dans les agrégats polycristallins. En utilisant des densités de maille variables, il a été montré qu'une répartition de taille de maille homogène, la plus fine possible était préférable afin de reproduire les effets de localisation aux joints de grains. L'analyse des champs locaux sous différentes conditions de chargement a souligné la nocivité des sollicitations de type biaxial en termes de déformation plastique, tant au niveau de l'intensité que de l'organisation



(a) Uniaxial-x (b) Uniaxial-y

(c) Biaxial-eq (d) Biaxial

Fig. 6 – Indicateur d'intensité et d'orientation des intrusions et extrusions de surface sous différents chargements.

spatiale de celle-ci. La prédiction des sites d'amorçage de fissures courtes s'est basée sur la formation des extrusions de surface pour déduire une forte probabilité d'initier une fissure près des joints de grains.

La discrétisation offerte par les Éléments Finis reste limitée pour reproduire fidèlement quantitativement le mécanisme de formation des marches d'intrusion et extrusion de surface, pour lesquelles la DDD est plus adaptée. L'idéal serait de calculer les champs de contraintes locaux par calcul d'agrégat et transmettre ces derniers au grain calculé en DDD. C'est pourquoi l'implémentation du couplage entre EF et DDD apportera une meilleure représentativité de ce phénomène.

Références

[1] K.J. Miller. The behaviour of short fatigue cracks and their initiation. Part II–A General summary. *Fatigue and Fracture of Engng Mat and Struct*, 10 :93–113, 1987.

[2] U. Essmann, U. Gösele, and H. Mughrabi. A model of extrusions and intrusions in fatigued metals : I. Point-defect production and the growth of extrusions. *Phil. Mag.*, 44 :405–426, 1981.

[3] B.-T. Ma and C. Laird. Overview of fatigue behavior in copper single crystals : I. Surface morphology and stage I crack initiation sites for tests at constant strain amplitude. *Acta Mat.*, 37 :325–336, 1989.

[4] J. Man, K. Ortblík, and J. Polák. Study of surface relief evolution in fatigued 316L austenitic stainless steel by AFM. *Mater. Sci. Eng.*, A351 :123–132, 2003.

[5] M. Herbig, A. King, P. Reischig, H. Proudhon, E.M. Lauridsen, J. Marrow, J.-Y. Buffière, and W. Ludwig. 3-D growth of a short fatigue crack within a polycrystalline microstructure studied using combined diffraction and phase-contrast X-ray tomography. *Acta Mat.*, 59 :590–601, 2011.

[6] C. Déprés, C.F. Robertson, and M.C. Fivel. Low-strain fatigue in 316L steel surface grains : a three dimension discrete dislocation dynamics modelling of the early cycles. Part 2 : Persistent slip markings and micro-crack nucleation. *Phil. Mag.*, 86(1) :79–97, 2006.

[7] M. Sauzay and P. Gilormini. Influence of surface effects on fatigue of microcracks nucleation. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 38 :53–62, 2002.

[8] Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J-M. Stéphan, and G. Cailletaud. Investigation of the effect of grain clusters on fatigue crack initiation in polycrystals. *Int. J. Fatigue*, 32 :1748–1763, 2010.

[9] F. Barbe, S. Forest, and G. Cailletaud. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part II : Results. *Int. J. of Plasticity*, 17(4) :537–563, 2001.

[10] Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J-M. Stéphan, and G. Cailletaud. Numerical investigations of the free surface effect in three-dimensional polycrystalline aggregates. *Computational Materials Science*, 70 :150–162, 2013.

[11] L. Méric and G. Cailletaud. Single crystal modeling for structural calculations. Part 2 : Finite element implementation. *J. of Engng. Mat. Technol.*, 113 :171–182, 1991.

[12] C. Farhat and F.-X. Roux. Implicit parallel processing in structural mechanics. *Computational Mechanics Advances*, 2(1) :1–124, 1994.

[13] Salome. `http://www.salome-platform.org`, 2008. Version 5.1.