

Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins sous chargements cycliques

S. Basseville^a, Y. Guilhem^b, H. Proudhon^c, T. Ghidossi^d, L. Signor^d, P. Villechaise^d,
G. Cailletaud^c

a. Laboratoire d'Ingénierie des Systèmes, Université de Versailles

b. MATEIS, INSA de Lyon, CNRS UMR 5510

c. Centre des Matériaux, Mines ParisTech, CNRS UMR 7633

d. Institut PPrime, CNRS, ENSMA, Université de Poitiers

Résumé :

L'étude proposée se base sur des calculs d'agrégats polycristallins par Éléments Finis avec un modèle de plasticité cristalline sous chargements cycliques. Des maillages d'agrégats sont construits à partir de données expérimentales 3D obtenues par EBSD et polissages successifs. Les résultats des simulations sont analysés et comparés aux observations expérimentales. L'objectif est de rendre compte de l'effet des paramètres de la microstructure sur la formation des fissures courtes de fatigue.

Abstract :

A numerical study in polycrystalline aggregates under cyclic loading is proposed. Aggregate meshes are constructed from experimental data obtained by EBSD and successive polishing. The numerical simulations are analyzed and compared with experimental results. The objective is to highlight the effect of the microstructure parameters on the initiation of short fatigue cracks.

Mots clefs : Plasticité cristalline, Fatigue, Éléments finis

1 Introduction

Dans les pièces mécaniques soumises à des sollicitations cycliques, les déformations répétées engendrent le phénomène de fatigue. Dans le cas des polycristaux, la localisation de ces déformations conduit à la formation de fissures courtes dont l'amorçage et la micropropagation sont pilotés par les paramètres de la microstructure du matériau, comme l'orientation des grains et les joints de grains.

L'étude numérique proposée se base sur des calculs d'agrégats polycristallins par Éléments Finis avec un modèle de plasticité cristalline sous conditions de chargements cycliques. Après la présentation du modèle de plasticité cristalline, le maillage « réel » construit à partir de données expérimentales 3D obtenues par EBSD et polissages successifs est présenté. Divers paramètres caractéristiques de la formation des fissures courtes sont ensuite répertoriés et étudiés. Enfin, les simulations numériques sont comparées à la microstructure réelle fissurée.

2 Mise en place des calculs

2.1 Modèle de plasticité cristalline et paramètre du modèle

Le matériau utilisé est l'acier 316L, principalement constitué de grains austénitiques, qui comporte un réseau cristallin de type Cubique à Faces Centrées. L'importance d'une représentation anisotrope du comportement élastique des grains [1], nous amène à introduire dans les calculs d'agrégats l'anisotropie élastique et plastique des grains. Le comportement élastique local est caractérisé par une matrice

d'élasticité de type cubique, définie dans le repère cristallin par trois coefficients C_{1111} , C_{1122} et C_{1212} .

$$\underline{\underline{C}} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1111} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{1122} & C_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} \end{pmatrix} \quad (1)$$

Le comportement plastique de chaque grain est régi par le modèle de monocristal de Méric-Cailletaud [2]. L'expression de la vitesse de glissement plastique de chaque système $\dot{\gamma}^s$ fait intervenir une loi d'écoulement viscoplastique de type fonction puissance avec une contrainte interne, et comporte un terme d'écrouissage isotrope r^s et un terme d'écrouissage cinématique x^s . La surface de charge, basée sur la cission résolue τ^s est calculée pour chaque système s à partir du tenseur de contraintes $\underline{\underline{\sigma}}$ et du tenseur d'orientation $\underline{\underline{m}}^s$.

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\underline{m}}^s \quad (2)$$

$$\tau^s = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m}}^s \quad (3)$$

$$\dot{\gamma}^s = v^s \text{sign}(\tau^s - x^s) \dot{v}^s \quad (4)$$

$$\dot{v}^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - \tau_0 - r^s}{K} \right\rangle^n \quad \text{avec } \langle x \rangle = \begin{cases} x & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$(6)$$

où τ_0 est la cission résolue critique initiale, \dot{v}^s est la vitesse de glissement sur le système s , K et n sont les coefficients matériau de la fonction de viscosité. Les lois d'évolution des écrouissages sont non linéaires et font intervenir la matrice d'interaction $[h]$:

$$x^s = c\alpha^s \quad (7)$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\alpha^s \dot{v}^s \quad (8)$$

$$r^s = bQ \sum_r h_{sr} \rho^r \quad (9)$$

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

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 et h_{rs} les composantes de la matrice d'interaction entre les systèmes de glissement. L'ensemble des paramètres matériaux pour le 316L utilisé sont présentés dans le tableau 1.

Coefficient	C_{1111}	C_{1122}	C_{1212}
Valeur [MPa]	197 000	125 000	122 000

Loi	Plasticité cristalline						
Paramètre	τ_0	K	n	Q	b	c	d
Valeur	40	12	11	10	3	40 000	1 500
Unité	MPa	MPa.s ⁻ⁿ		MPa		MPa	

Loi	Matrice d'interaction					
Paramètre	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6
Valeur	1	1	0,6	12,3	1,6	1,3

TABLE 1 – Valeurs des paramètres matériaux issus de l'identification, [3].

2.2 Maillage et conditions limites

Un agrégat est alors construit à partir de données expérimentales 3D obtenues par EBSD et polissages successifs. La région étudiée est localisée autour d'un grain maclé présentant deux microfissures, pour deux tailles d'agrégats (crop3 > crop2), Fig 1. Les principales informations expérimentales sont résumées dans le tableau 2 et montrent que la microfissure peut être associée aux systèmes de glissement C1 ou B2 pour lesquels le facteur de Schmid μ est le plus fort.

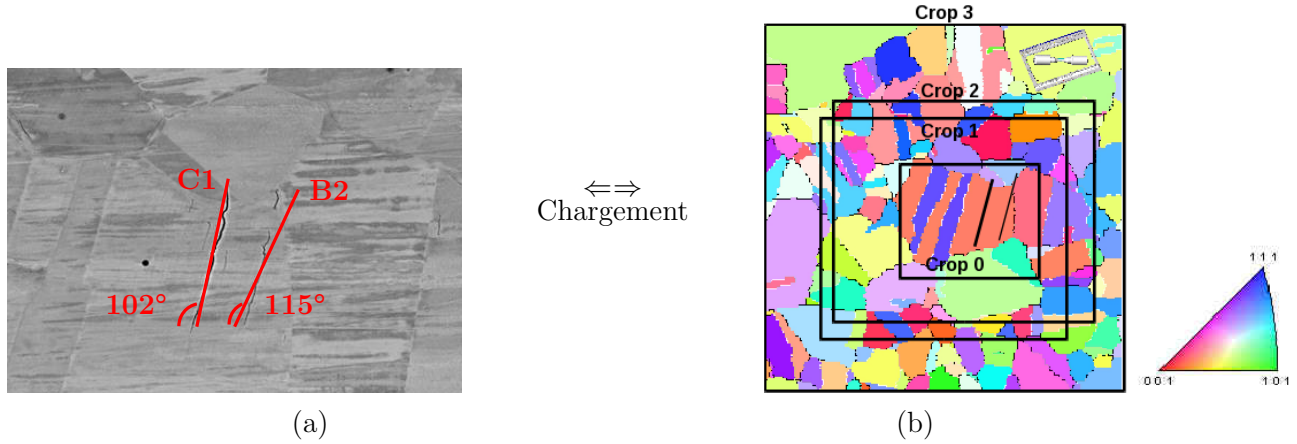


FIGURE 1 – (a) Microfissure transgranulaire dans le grain central, (b) Cartographie EBSD de la région étudiée au voisinage de la fissure. Illustration des tailles de maillage.

μ	Syst Act	Rang	Angle
0.482	C1	1 ^{er}	102°
0.402	B2	2 ^e	115°

TABLE 2 – Analyse cristallographique du grain fissuré.

Le maillage crop3 (respectivement crop2) a une dimension de $464 \times 488 \times 117 \mu\text{m}$ (respectivement $320 \times 284 \times 117 \mu\text{m}$) et contient 386 grains (respectivement 157 grains). Les éléments utilisés sont des éléments hexaédriques linéaires de taille $4 \times 4 \times 3 \mu\text{m}$ à intégration exacte (Fig 2). Ce maillage comprend 551 928 éléments, 575 640 nœuds, soit 1 726 920 DDL (respectivement 221 520 éléments, 233 280 nœuds, soit 699 840 DDL). Le grain central correspond à la réunion de 3 régions distinctes en surface, séparées par deux macles qui ne traversent pas tout le grain en profondeur. Les conditions appliquées lors des simulations reproduisent le chargement appliqué lors des essais expérimentaux (Fig 2). Des conditions de symétrie sont appliquées sur les faces cachées X_0 , Y_0 , Z_0 . La surface Z_1 est libre de contrainte. Le chargement considéré est le suivant : Déplacement normal à la face Y_1 uniforme réglé par une « contrainte multi-point » ; Déplacement normal à la face X_1 uniforme cyclique donnant $\Delta\varepsilon_p/2 = \pm 0.2\%$.

2.3 Variables et paramètres étudiés

L'influence des paramètres microstructuraux sur la formation des fissures de fatigue, notamment sur la localisation de la déformation plastique est étudiée et peut être caractérisée à travers différentes variables et à différentes échelles. On peut citer par exemple la somme des glissements cumulés $\sum \gamma_{cum}$, reliée à la densité de dislocations ; la déformation plastique équivalente au sens de von Mises ε_{mises}^p , la contrainte équivalente au sens de von Mises σ_{mises} ; le nombre de systèmes de glissements actifs N_γ ; un indicateur de la hauteur γ_{surf} et de l'orientation des intrusions et extrusions en surface \underline{l}_{surf} , [3] ; le rapport $|\tau^1|/|\tau^2|$ entre les activités des glissements plastiques du système primaire (1) qui a le plus grand facteur de Schmid macroscopique et du système secondaire (2) qui a le deuxième facteur de Schmid macroscopique, témoin de la déviation apportée par l'aspect polycristal ; le rapport $\gamma_{cum}^1/\gamma_{cum}^2$ entre le glissement cumulé sur le système primaire qui a le plus grand facteur de Schmid macroscopique

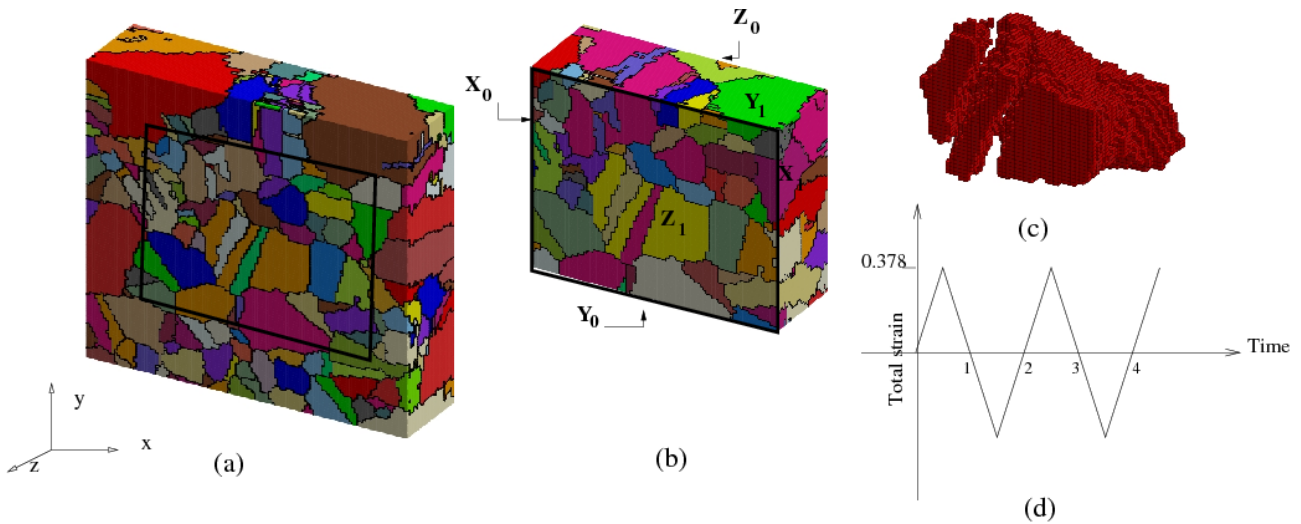


FIGURE 2 – Maillage de l'agrégat « réel » (a) crop3, (b) crop2, (c) du grain central. (d) Chargement.

et le glissement cumulé sur le système secondaire qui a le deuxième facteur de Schmid macroscopique, témoin de l'aspect tendance au glissement simple/multiple; ou encore le rapport $\gamma_{cum}^{max}/\sum \gamma_{cum}$ entre le glissement maximal et la somme des glissements, autre témoin de l'aspect tendance au glissement simple/multiple.

3 Résultats et discussion de la modélisation par Éléments Finis

Les cartes de la déformation plastique équivalente ε_{mises}^p laissent apparaître des bandes de localisations orientées à $\pm 45^\circ$ dans la direction de chargement (Fig 3). La localisation de la plasticité est essentiellement marquée aux joints de grains. L'état mécanique du grain central est influencé par la taille de l'agrégat et donc par les conditions aux limites.

L'analyse de l'activité plastique du système de glissement primaire et secondaire de tous les grains de l'agrégat à la fin du second cycle est illustrée en figure 4. Bien que l'activité du système primaire γ_{cum}^1 soit importante à la surface du grain central dans le voisinage de la zone d'amorçage de la fissure, il ne s'agit pas de l'activité maximale. Cette dernière est obtenue au niveau des grains voisins, si l'on ne prend pas en compte les grains affectés par les conditions limites. L'activité de glissement plastique cumulé du système secondaire γ_{cum}^2 reste faible au niveau du grain central mais semble présente au niveau des joints de grain de celui-ci, dans la zone d'amorçage de la fissure (Fig 4.b).

L'intensité et l'orientation des PSM sur la surface libre Z_1 ainsi qu'un zoom au niveau du grain central à la fin du second cycle sont présentées sur la figure 5. La majeure partie des grains donne des traces 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. Le grain fissuré donne des traces pour un seul plan avec une intensité plus élevée que les grains voisins et avec une orientation en accord avec les observations expérimentales (traits rouges).

Les cartographies 6 illustrent la présence d'un glissement simple au niveau de la surface libre du grain fissuré, plus précisément dans la zone d'amorçage de la fissure. Ces résultats complètent les résultats sur les marches d'intrusions/extrusions.

4 Conclusion

Les calculs numériques d'agrégats polycristallins avec un modèle de plasticité cristalline sous chargements cycliques sont menés et sont en accord avec les observations expérimentales. Les résultats renforcent l'idée que l'utilisation d'un agrégat de trop petite taille peu conduire à des états mécaniques locaux influencés par les conditions limites. De nouveaux outils sont développés afin d'avoir une vision globale de l'activité plastique dans chaque grain. Un indicateur sur la hauteur et l'orientation des intrusions/extrusions en surface permet de localiser correctement la zone d'amorçage de fissure. Enfin, la

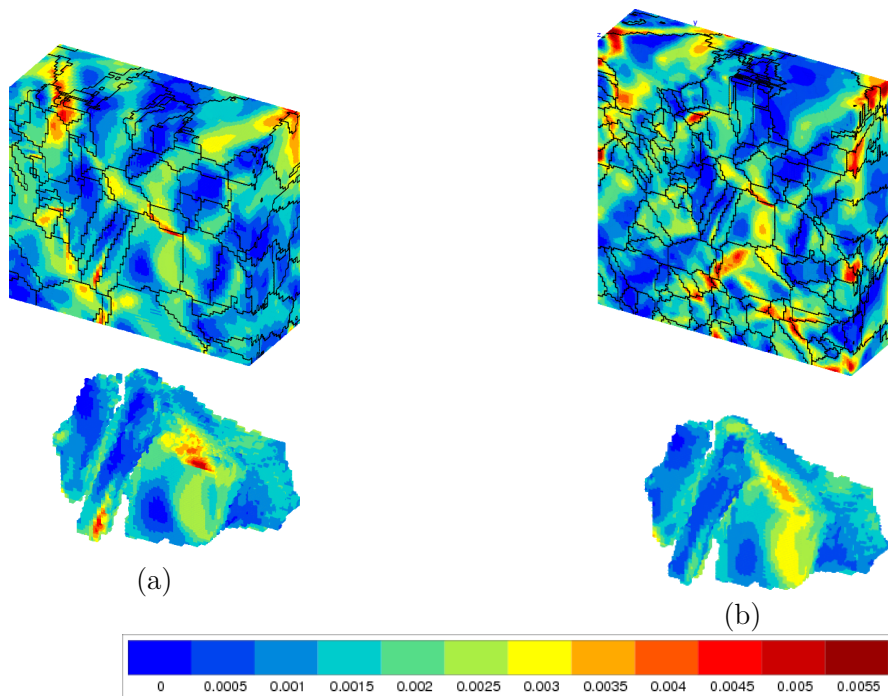


FIGURE 3 – Déformation équivalente de von Mises ε_{mises}^p sur la surface libre Z_1 et au niveau du grain fissuré (a) crop2 (b) crop3 à la fin du second cycle.

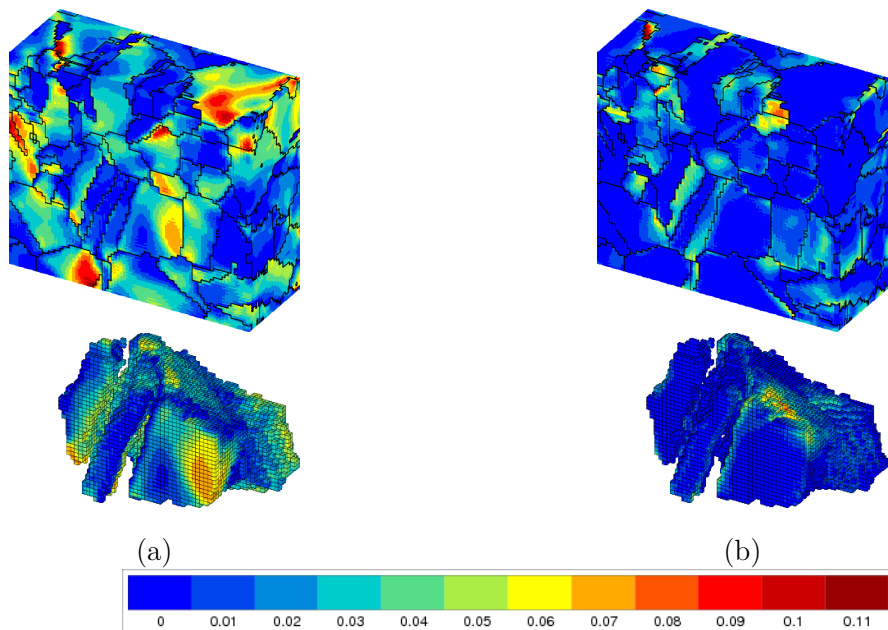


FIGURE 4 – Activité du glissement plastique cumulé (a) Système primaire γ_{cum}^1 (b) Système secondaire γ_{cum}^2 sur la surface libre Z_1 , crop2.

tendance au glissement simple/multiple est abordée.

Références

- [1] Sauzay, M. 2006 Effet de l'anisotropie élastique cristalline sur la distribution des facteurs de Schmid à la surface des polycristaux. *C.R. Mécanique* **334** 353-361
- [2] Méric, L. et Cailletaud, G. 1991 Single Crystal Modeling for Structural Calculations. Part 2 : Finite Element Implementation *J. of Engng. Mat. Technol.* **113** 171-182

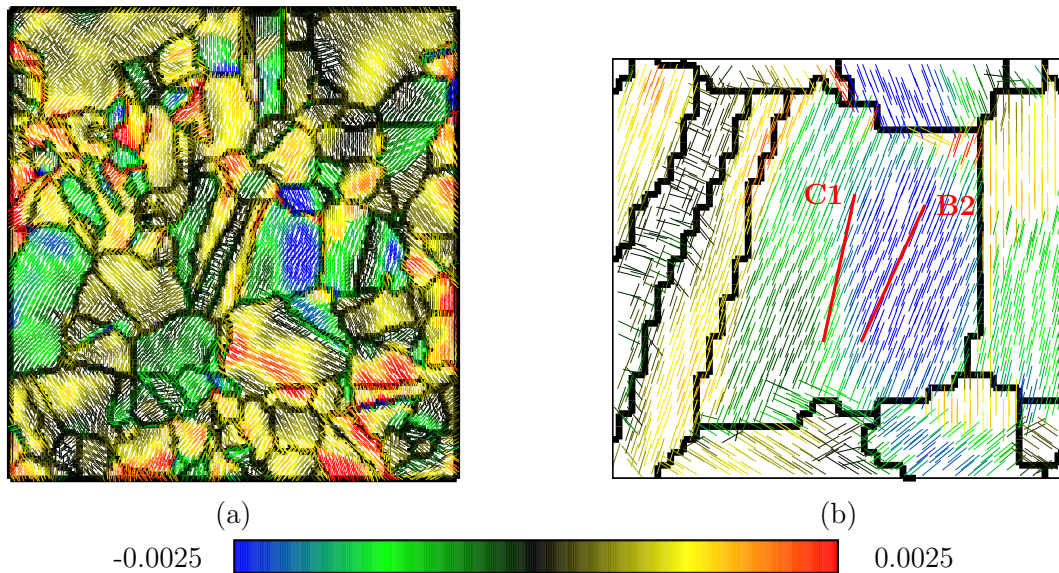


FIGURE 5 – Indicateur d'intensité et d'orientation des PSM de l'agrégat F30 crop3 (a) sur la surface libre Z_1 (b) zoom au niveau du grain central à la fin du second cycle. Les traits rouges indiquent la position des fissures observées expérimentalement.

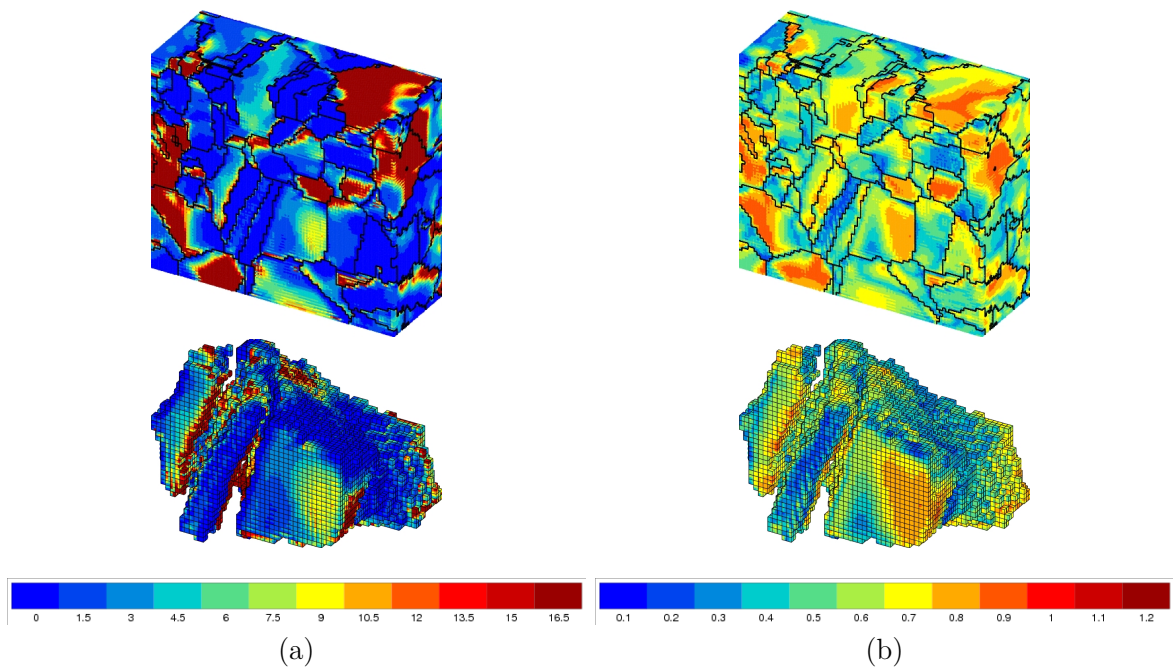


FIGURE 6 – (a). Rapport $\gamma_{cum}^1 / \gamma_{cum}^2$, (b) Rapport $\gamma_{cum}^{max} / \sum \gamma_{cum}$, crop2.

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

[4] Mineur, M. et Villechaise, P. et Mendez, J. 2000 Influence of the crystalline texture on the fatigue behavior of a 316L austenitic stainless steel. *Mater. Sci. Eng.* **A286** 257-268

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