

Simulation numérique par éléments finis d'agrégats polycristallins soumis à des chargements thermomécaniques issus du soudage

C. Zhang^a, Y. Charles^a, M. Gaspérini^a, B. Bacroix^a, V. Robin^b, G. Perrin^c

a. *Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux (LSPM-CNRS), Université Paris 13, PRES Sorbonne Paris Cité, 99 avenue JB Clément, 93430 VILLETANEUSE*

b. *AREVA NP, Mechanical Engineering Lyon Department, PEELS-F, 10 rue Juliette Récamier, 69456 LYON CEDEX*

c. *AREVA, Tour Areva, 1 place Jean Millier, 92084 PARIS La DEFENSE CEDEX*

Résumé :

Des simulations numériques d'agrégats polycristallins ont été effectuées sur un acier inoxydable austénitique soumis à des conditions de chargement thermomécanique cyclique issues d'un calcul de soudage multi-passes. Le comportement du matériau est basé sur les mécanismes de plasticité du monocristal c.f.c., avec des lois élasto-plastiques dépendantes de la température. Des procédures numériques ont été développées pour transférer les conditions aux limites locales issues de la simulation numérique du soudage et pour calculer les contraintes normales et tangentielles aux joints de grains. Les calculs ainsi réalisés permettent d'étudier la variabilité des distributions de contraintes pour différentes textures cristallographiques ou morphologiques.

Abstract :

Numerical simulations of polycrystalline aggregates were made for an austenitic stainless steel submitted to cyclic thermomechanical loading resulting from a multipass welding operation. The constitutive behavior is based on crystalline plasticity mechanisms for f.c.c. single crystal, with temperature dependent elasto-plasticity. Numerical procedures were developed for boundary conditions transfer at local scale and for normal and tangential stress computation at grain boundaries. Such simulations allow to study the variation of stress distribution for different crystallographic or morphologic textures.

Mots clefs: simulation éléments finis, plasticité cristalline, thermomécanique, anisotropie

1 Introduction

Les procédés de soudage multi-passes de tubes en acier inoxydable austénitiques induisent des chargements thermomécaniques cycliques complexes, susceptibles d'affecter le matériau au-delà de la zone affectée thermiquement. Les effets sur les hétérogénéités de contraintes et de déformations intra et intergranulaires sont encore mal compris. Les simulations par éléments finis sont un outil précieux pour la modélisation du soudage [1,2], mais elles restent restreintes généralement à des lois de comportement globales supposant le matériau isotrope et homogène. Or, la prise en compte des mécanismes de plasticité du monocristal dans des simulations de polycristaux mettent en évidence les hétérogénéités induites par l'anisotropie locale du matériau, comme cela a été montré récemment dans le cas de chargements thermomécaniques cycliques uniaxiaux [3].

Cet article présente la mise en œuvre de simulations numériques d'agrégats polycristallins soumis à des conditions de chargement thermomécaniques issues d'une opération de soudage multi-passes. Le but est d'analyser les effets de texture cristallographique et de taille de grains sur les distributions des champs mécaniques, notamment aux joints de grains, en vue de définir des critères de décohésion intergranulaire.

Les simulations numériques ont été effectuées avec le code de calcul Abaqus [4], à partir de conditions de chargement issues d'un calcul industriel de soudage mené avec Sysweld [5], et ont nécessité différentes

procédures numériques spécifiques, pour la définition du comportement, des conditions aux limites, et la réalisation du post-traitement des résultats.

2 Loi de comportement

Le comportement du matériau a été considéré thermo-élastoplastique. Deux modélisations du comportement ont été utilisées, l'une en thermo-élastoplasticité isotrope, l'autre basée sur l'élastoviscoplasticité du monocristal. Dans les deux cas, les paramètres introduits dépendent de la température.

2.1 Comportements mécaniques

Pour l'élastoplasticité isotrope, le matériau obéit au critère de von Mises, avec une loi d'écrouissage isotrope saturante de Voce

$$\sigma_Y = \sigma_0 + R_{\text{sat}} \left(1 - e^{-C \varepsilon_{\text{eq}}}\right) \quad (1)$$

où ε_{eq} représente la déformation plastique cumulée, et σ_0 la limite élastique. L'élasticité est décrite par le module d'Young E et le coefficient de Poissons ν .

Le comportement plastique du monocristal est décrit par les lois classiques de la plasticité cristalline. La vitesse de glissement $\dot{\gamma}^\alpha$ sur le système α est reliée à la cission résolue τ^α par une loi puissance

$$\dot{\gamma}^\alpha = a^\alpha \left(\frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \right) \left| \frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \right|^{n-1}, \quad (2)$$

où a^α est la vitesse de déformation référence sur le système α , et n est l'indice de sensibilité à la vitesse [6-7]. L'écrouissage est caractérisé par l'évolution de la cission résolue critique g^α avec les vitesses de glissement sur les différents systèmes :

$$\dot{g}^\alpha = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^\beta, \quad (3)$$

où les coefficients $h_{\alpha\beta}$ traduisent l'auto-écrouissage ($\beta=\alpha$) et l'écrouissage latent ($\beta \neq \alpha$), avec

$$h_{\alpha\beta} = q h_{\alpha\alpha} \quad (\alpha \neq \beta) \quad \text{et} \quad h_{\alpha\alpha} = h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0}{\tau_s - \tau_0} \right| \quad (4)$$

où h_0 , τ_0 et τ_s représentent respectivement le module d'écrouissage initial, la cission résolue critique initiale et la cission critique maximale [5], et γ est le glissement cumulé sur tous les systèmes,

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^{\gamma} \dot{\gamma}^\alpha dt \quad (5)$$

Dans cette étude, les systèmes de glissement faciles considérés sont les 12 systèmes $\{111\}\langle 110 \rangle$ de l'austénite (structure c.f.c.). L'élasticité anisotrope est décrite par les coefficients C_{ij} .

2.2 Identification

Les paramètres des lois de comportement ont été identifiés par méthode inverse à partir d'essais de traction issus de la littérature [8] et effectués à différentes températures allant de 297 à 1100 K.

TABLE 1 - Coefficients de dilatation thermique

T (°C)	20	200	400	600	800	1000	1400
$\alpha (\times 10^{-6} \text{°C}^{-1})$	0	17.2	18.2	18.8	19.1	19.4	20

Pour la plasticité cristalline, l'identification a été effectuée via la définition d'un agrégat de 12000 grains d'orientations aléatoires et conduisant à une texture cristallographique isotrope. Les tableaux 1 et 2

récapitulent les paramètres des lois de comportement utilisées.

TABLE 2 - Paramètres de la loi de la plasticité cristalline

T (K)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	n	ḡ (s ⁻¹)	h ₀ (MPa)	τ _s (MPa)	τ ₀ (MPa)	q
297	261	112	75	20	0.001	210	305	65	1.1
977	201	86	57	10		228	70	18	1.2
1100	172	74	49	10		200	35	15	1.2

3 Méthodologie de simulation numérique

3.1 Géométrie et Maillage

L'étude porte sur une portion de tube cylindrique soudé en acier austénitique inoxydable 304L, voisine de la zone soudée, et proche de la surface extérieure. La zone étudiée correspond à une plaquette de dimensions 2,0×2,0×0,1mm³ selon les directions X,Y,Z du tube, où Y est l'axe du cylindre, et Z la direction circumférentielle. Des agrégats polycristallins 3D ont été générés par extrusion de géométries 2D, issues d'images de microstructures réelles (notée RM) déterminées par MEB-EBSD (figure 1a), ou de microstructures idéalisées basées sur des pavages réguliers hexagonaux (notés HM), dont la taille correspond à la taille de grain moyenne mesurée expérimentalement. Les orientations cristallographiques de chaque grain sont définies à partir des mesures EBSD pour RM, et générées aléatoirement à l'aide d'une procédure Fortran ORIENT [4] pour les configurations HM.

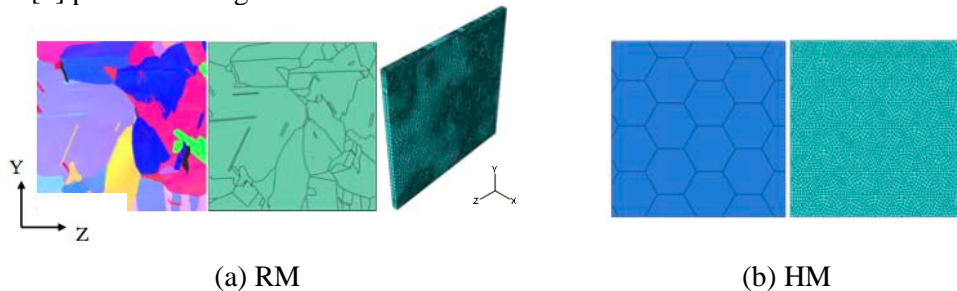


FIG.1 - Agrégats polycristallins 3D : (a) microstructure 2D réelle déterminée par MEB-EBSD et modèle 3D extrudé associé ; (b) agrégats polycristallins virtuels 3D, où chaque hexagone simule un grain.

Le maillage de ces microstructures est réalisé en utilisant des éléments trilineaires à 8 nœuds possédant un degré de liberté en température en plus de ceux en déplacements (C3D8T), et à 8 points de Gauss. Les microstructures idéalisées sont produites à l'aide de commandes Python.

3.2 Conditions de chargement

Les conditions de chargement (déplacements et température au cours du temps) ont été appliquées à partir des résultats d'un calcul axisymétrique d'une vingtaine de passes de soudage réalisé avec le logiciel Sysweld. Le temps interpassage est de 10⁴ s. Le développement d'une procédure utilisateur (DISP.f de la figure 4) a permis de transférer l'ensemble des données utiles du logiciel Sysweld au logiciel Abaqus, sur des maillages non coïncidents.

Les déplacements et la température de tous les nœuds situés sur les surfaces externes du maillage polycristallin 3D sont fixés par les conditions de chargement. Sur la figure 2b-c est représentée la variation temporelle du chargement thermique pour 4 nœuds de la plaque étudiée ; sur la figure 3 sont données les variations spatiales des conditions limites. Chaque pic (figure 2) représente une passe de soudage : la température maximale de chaque pic augmente au fur et à mesure des passes, ainsi que les gradients spatiaux comme le montre la figure 3 à l'issue de la 20^{ème} passe.

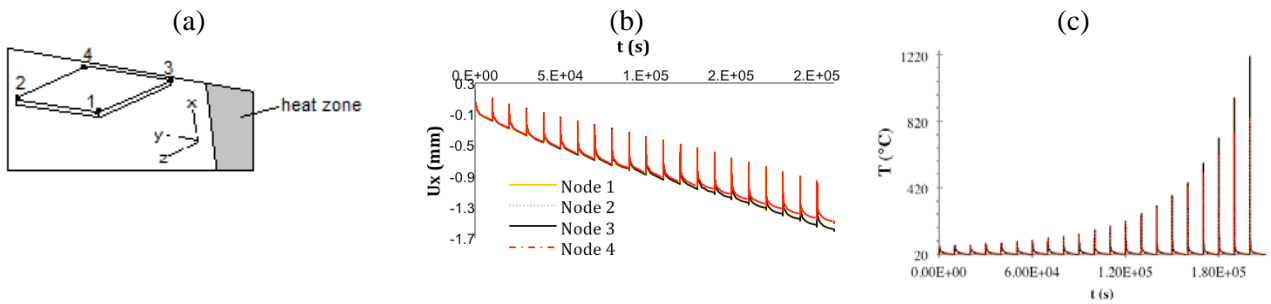


FIG. 2 - Conditions de chargements temporels sur les quatre coins de la plaque étudiée, représentée en (a) avec le plan d'axisymétrie initial ; (b) variation du déplacement selon X et (c) variation de la température en fonction du temps.

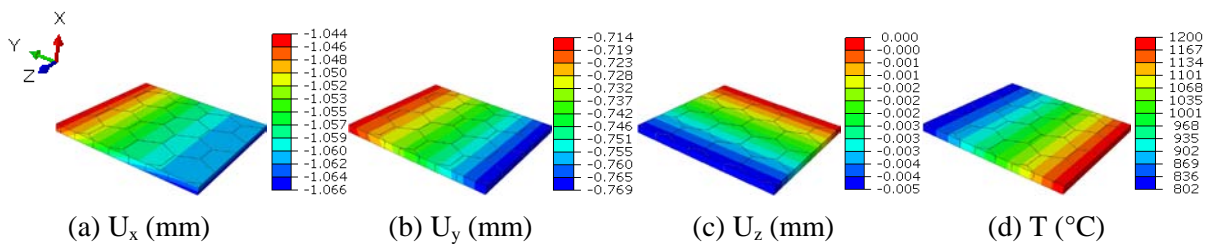


FIG. 3 – Répartition spatiale des conditions de chargements à la température maximale de la dernière passe ($t=20.10^4$ s).

3.3 Mise en place de la simulation

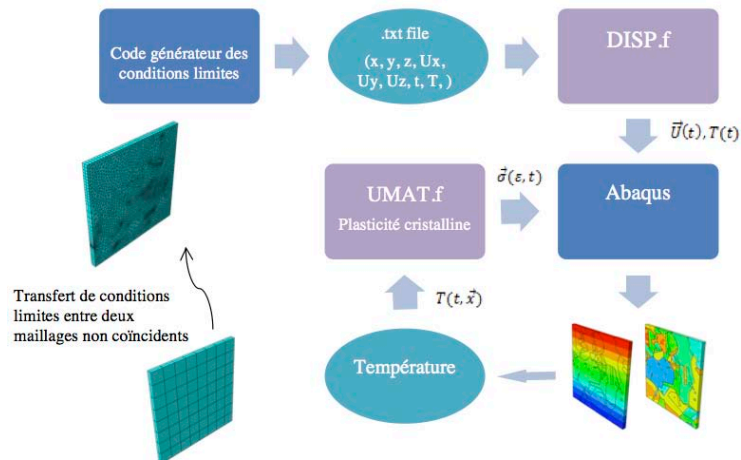


FIG. 4 – Schéma de la mise en œuvre du calcul.

Les calculs ont été effectués à l'aide d'Abaqus Standard, en utilisant la procédure 'coupled Temperature-Displacement', en régime permanent pour ce qui concerne les champs de température. Le comportement mécanique isotrope a été défini en utilisant les procédures classiques d'Abaqus, tandis que le comportement cristallin a pu être défini par l'utilisation d'une routine UMAT.f de la littérature [7], modifiée pour prendre en compte le couplage thermique et améliorer son comportement en convergence. Le schéma global du calcul est donné sur la figure 4.

Enfin, à la fin du calcul thermomécanique, les contraintes normales et tangentielles aux joints de grains (constitués de nœuds) sont calculées à l'aide de scripts Python, afin de quantifier les variations de contraintes dues à l'hétérogénéité de comportement aux interfaces de la microstructure. Ces contraintes sont calculées aux points de Gauss des éléments adjacents aux joints de grains du maillage.

4 Résultats et discussion

Plusieurs calculs sur des microstructures idéales ont été effectués, où seule la texture générée aléatoirement est modifiée. Sur la figure 5 sont représentées les distributions de contraintes maximales principales

lors du pic de température de la dernière passe de soudage pour quatre microstructures, dont les textures sont figurées par leur figure de pole des plans {100}.

On peut ainsi constater que les distributions de contrainte présentent des similitudes entre les quatre calculs, liées aux conditions aux limites, mais que de fortes fluctuations se manifestent selon les orientations locales, affectant notamment les lieux et les niveaux de traction ou de compression.

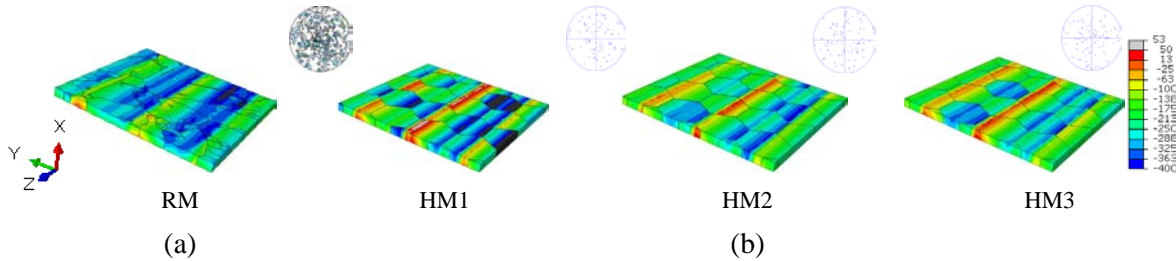


FIG.5 - Contraintes principales maximales pour les microstructures (a) réelle et (b) idéalisées.

Sur la figure 6 sont représentées les distributions de contrainte de von Mises pour le modèle isotrope d'une part et deux microstructures idéales d'autre part, ainsi que les contraintes normales aux joints de grains pour ces trois calculs. Les résultats présentés correspondent au pic de température de la dernière passe de soudage.

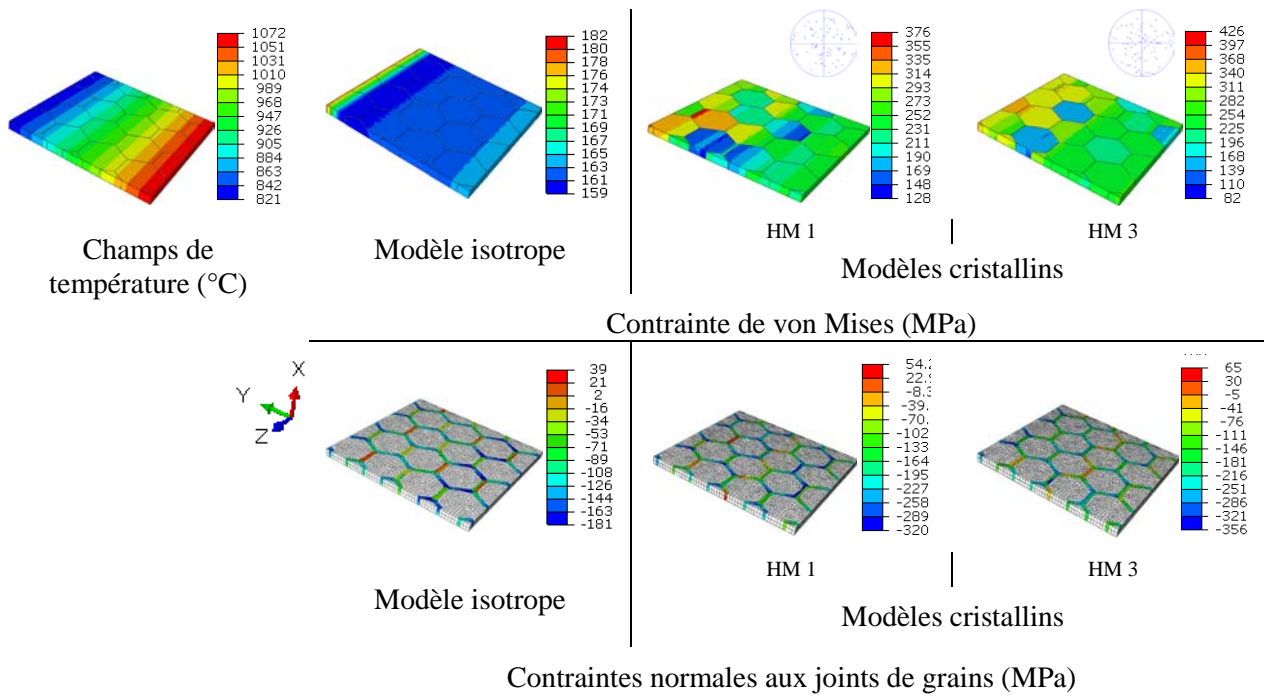


FIG. 6 – Résultats au voisinage du pic de température de la dernière passe de soudage pour les modèles isotrope et cristallins : Contrainte équivalente de von Mises et contraintes normales aux joints de grains.

Alors que le modèle homogène révèle une répartition relativement homogène du champ de contrainte, l'anisotropie cristalline induit une très forte hétérogénéité d'un grain à l'autre. La distribution des contraintes normales aux joints de grains est également beaucoup plus étalée pour les calculs cristallins que dans le cas homogène, comme illustré par la figure 7.

Les calculs montrent que la distribution des contraintes normales aux joints de grains ne dépend que faiblement de la variation de texture entre les différents polycristaux considérés. Par contre, cette répartition est beaucoup plus étalée que pour le calcul isotrope, dans lequel les gradients de contraintes sont uniquement induits par le champ thermique et le champ de déplacement imposés par les conditions aux limites. De plus on peut noter que les calculs cristallins peuvent induire des contraintes normales maximales selon des joints de grains qui ne sont pas systématiquement normaux à la direction du gradient thermique, contrairement au cas isotrope.

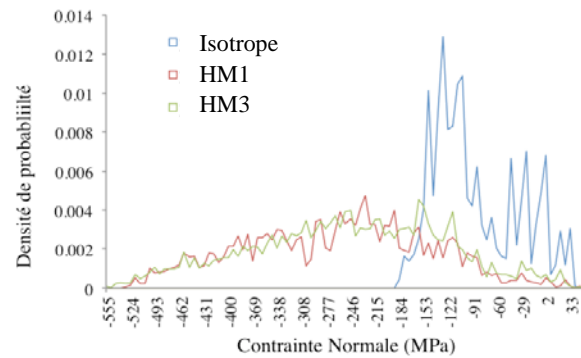


FIG. 7 – Densité de probabilité des contraintes normales au voisinage du pic de température de la dernière passe de la simulation ; comparaison entre calculs cristallins et calcul isotrope.

5 Conclusion

Les calculs développés lors de cette étude ont permis de comparer les champs mécaniques dans des plaques polycristallines modèles, à la suite d'un chargement thermomécanique cyclique complexe et sévère. Ces comparaisons ont d'une part été effectuées entre différents polycristaux, et avec une plaque ayant un comportement mécanique homogène. Diverses procédures ont été programmées dans ce cadre, afin de transférer des conditions limites entre deux codes et deux maillages, de définir des microstructures modèles et d'y affecter des orientations aléatoires, et de post-traiter les résultats sous forme de contraintes normales aux interfaces. Les outils numériques ainsi disponibles permettent d'étudier la sensibilité des résultats aux orientations locales, et sont utilisables pour étudier statistiquement la réponse à différentes configurations. Dans les cas testés, les distributions de contraintes normales aux joints de grains sont fortement plus étalées que dans le cas d'un comportement homogène et ne semblent pas augmenter la probabilité d'une forte contrainte normale aux joints de grains. La définition de critères de nocivité doit toutefois être approfondie.

Remerciements

C.Z, Y.C., B.B. et M.G. remercient Areva pour le soutien financier à l'étude et l'autorisation de publier les résultats.

Références

- [1] Deng, D., Numerical and experimental investigations on welding residual stress in multi-pass butt-welded austenitic stainless steel pipe, *Computational Materials Science*, 42, 234-244, 2008.
- [2] Feulvarch E., Robin V., Bergheau J.M., Thermometallurgical and mechanical modeling of welding - application to multipass dissimilar metal girth welds, *Journal of Science and Technology of Welding and Joining*, 16, 221-231, 2011.
- [3] Y. Li, V. Aubin, C. Rey, P. Bompard, Polycrystalline numerical simulation of variable amplitude loading effects on cyclic plasticity and microcrack initiation in austenitic steel 304L, *Computational Materials Science*, 64, 7-11, 2012.
- [4] Abaqus 2011, User Subroutine Reference Manual.
- [5] Sysweld 2011, User's Manual, ESI Group.
- [6] Asaro R.J., *Micromechanics of Crystals and Polycrystals*, *Advances in Applied Mechanics*, 23, 1-115, 1983.
- [7] Huang. Y., A user-material subroutine incorporation single crystal plasticity in the ABAQUS finite element program, Mech. Report 178, Division of Applied Sciences, Harvard University, Cambridge, Massachusetts 02138, June 1991.
- [8] Chavez S.A., Korth G.E., Harper D.M., High-temperature tensile and creep data for Inconel 600, 304 stainless steel and SA 106B carbon steel, *Nuclear Engineering and Design*, 148, 351-363, 1994.