

## Influence de l'élasticité et de la plasticité cristallines sur la distributions des champs mécaniques à la surface des polycristaux

Maxime Sauzay<sup>1</sup>, Stéphane Osterstock<sup>1,2</sup>, Christian Robertson<sup>1</sup>, Suzanne Degallaix<sup>2</sup>,  
Véronique Aubin<sup>2</sup> & Pavel Hutar<sup>1</sup>

<sup>1</sup> CEA Saclay, DEN-DMN-SRMA, bât. 455, 91191 Gif-sur-Yvette cedex

<sup>2</sup> LML (UMR CNRS 8107), Ecole Centrale Lille, BP 48, 59651 Villeneuve d'Ascq cedex  
maxime.sauzay@cea.fr

### Résumé :

*Cette étude vise, par une modélisation par éléments finis 3D, à évaluer les dispersions des champs mécaniques entre grains de surface d'un polycristal en acier inoxydable austénitique type AISI 316LN, en fonction de l'orientation du grain (configuration inter-orientations) et en fonction des orientations des grains environnants (configuration intra-orientation). Le comportement des grains est caractérisé par une élasticité linéaire, isotrope ou anisotrope (élasticité cubique), et une plasticité cristalline à écrouissage plus ou moins prononcé (structure Cubique à Face Centrée, écrouissage monotone ou cyclique).*

*On montre que :*

- les amplitudes des distributions calculées en régime purement élastique sont supérieures ou égales que celles obtenues en régime élasto-(visco)plastique pour des déformations macroscopiques de plus 1%. L'effet de l'anisotropie de l'élasticité cristalline sur les champs locaux est sensible jusqu'à une déformation macroscopique de l'ordre de 0.2 % à 1% selon l'écrouissage macroscopique choisi (monotone ou cyclique dont le durcissement est plus prononcé).
- les distributions intra-orientation sont au moins aussi dispersées que les distributions inter-orientations
- les contraintes axiales obtenues pour une orientation donnée, soit en configuration inter-orientations (absence de grain voisin), soit en configuration intra-orientation en calculant la moyenne sur tous les grains de cette même orientation mais de voisins différents sont très proches en régime purement élastique mais diffèrent nettement en régime élasto-plastique.

### Abstract :

*This 3D Finite Element study aims to evaluate the mechanical field scatter between surface grains of a polycrystal of austenitic stainless steel type AISI 316LN, as a function of the grain orientation ( inter-orientations configuration) and as a function of the neighbouring grain orientations (intra-orientation configuration). Grain constitutive laws are characterized by a linear elasticity, isotropic or anisotropic (cubic elasticity) and by a crystalline plasticity (Face Centred Cubic structure) with more or less strong hardening (monotonic or cyclic work-hardening).*

*Some results should be noticed:*

- the distributions calculated in the purely elastic regime are as scattered as the distributions calculated in the elastic-plastic regime (macroscopic strains higher than 1%). The effect of crystalline elasticity anisotropy is noticeable for macroscopic strains smaller than 0.2% to 1% depending on the hardening
- the intra-orientation distributions are at least as scattered as the inter-orientations distributions
- the local tensile stress characterizing a given orientation and calculated either using the inter-orientations configuration or the average on all the grains with this orientation but with different neighbouring grains are about the same in the elastic regime, but clearly different in the elastic-plastic regime.

### Mots-clefs :

**Polycristal, élasticité cubique, plasticité cristalline**

## 1 Introduction

Jusque dans les années 90, les modèles d'homogénéisation proposés pour représenter le comportement d'un polycristal reposaient généralement sur une hypothèse de champs uniformes dans tous les grains de même orientation cristallographique. Pourtant, dans un polycristal, les grains d'une même orientation sont entourés de voisins d'orientations cristallographiques différentes et variables d'un grain à l'autre. Ces effets de voisinage peuvent induire de la dispersion entre les grains de la même orientation. Considérant toutes les orientations possibles des grains voisins, les valeurs moyennes des contraintes dans les grains d'orientation donnée ainsi que leur dispersion dépendent à la fois de l'anisotropie de l'élasticité cristalline et de l'anisotropie de (visco)plasticité cristalline. Récemment, plusieurs études ont été publiées concernant l'influence du comportement viscoplastique cristallin sur cette dispersion. Ces études se fondent sur des calculs numériques d'agrégats cristallins de grande taille (Cailletaud *et al.* (2003) ; Lebensohn *et al.* (2004)) ou sur des approches de type homogénéisation avec évaluation de la dispersion intra-orientation (Lebensohn *et al.* (2004)). Concernant l'influence des paramètres de l'élasticité cristalline des réseaux cubiques, des études numériques mettent en évidence un effet notable du facteur d'anisotropie élastique pour des métaux et alliages CFC (acier austénitique, cuivre, nickel) (Sauzay *et al.* (2006) ; Sauzay (2007)). Mais, à notre connaissance, peu d'études se sont intéressées à l'effet conjoint de l'élasticité cubique et de la plasticité cristalline. Quels sont leurs effets sur les dispersions inter-orientation (configuration grain isolé/matrice) et intra-orientation (grains d'orientation donnée mais dont les voisins ont des orientations variables)? Quand est-il possible de négliger l'une ou l'autre des anisotropies de l'élasticité ou de la (visco)plasticité ?

La présente étude, basée sur des calculs par éléments finis d'agrégats cristallins, tente de répondre à ces questions en utilisant d'une part une configuration inclusion-matrice et d'autre part une configuration grain-grains voisins-matrice. L'influence de l'anisotropie de l'élasticité cubique est étudiée en considérant à l'échelle des grains soit l'élasticité isotrope, soit l'élasticité cristalline de l'austénite (forte anisotropie, Huntington (1958)). De même, le rôle du comportement (visco)plastique est exploré en considérant d'une part le comportement en traction monotone d'un acier inoxydable austénitique à 550°C (faible limite d'élasticité, faible taux de durcissement) et d'autre part la courbe d'écrouissage cyclique obtenue dans les mêmes conditions (limite d'élasticité et surtout taux de durcissement plus élevés) (Sauzay *et al.* (2004)). Les dispersions inter-orientations et intra-orientation sont évaluées et discutées.

## 2 Méthodologie

Deux configurations sont étudiées :

- Une configuration grain-matrice permet le calcul de la distribution inter-orientations. Un grain (FIG. 1 b)), de loi de comportement cristallin, est situé à la surface d'une large matrice (FIG. 1 a)) dont le comportement obéit à la loi macroscopique. Une cinquantaine d'orientations aléatoires sont considérées, en supposant le matériau non texturé.
- une configuration grain-grains voisins-matrice permet le calcul de la distribution intra-orientation. L'orientation du grain central est fixe (FIG. 1 b)) (grain bien orienté pour le glissement ou grain pour lequel l'axe de traction macroscopique est un axe  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  ou  $\langle 111 \rangle$ ) tandis que celles des grains voisins sont aléatoires (une cinquantaine de jeux de 13 orientations) (FIG. 1 c)). L'agrégat est situé à la surface de la matrice (FIG. 1 a))

Le comportement élastique macroscopique du polycristal est supposé isotrope (module d'Young de 143 GPa et coefficient de Poisson de 0.3 pour l'acier austénitique 316LN à 550°C). Le comportement élastique cristallin est défini grâce à trois paramètres homogènes à des contraintes,  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  (notation de Voigt, élasticité cubique) (Huntington (1958)). L'anisotropie induite est estimée grâce à un coefficient d'anisotropie adimensionné défini par :

$a=2C_{44}/(C_{11}-C_{12})$  qui vaut 1 pour le comportement isotrope et 3.3 pour l'austénite. Les coefficients sont ceux donnés par Huntington (1958), corrigés de l'effet de température par le rapport des modules d'Young (200 GPa à 20°C). L'acier austénitique possède une structure CFC. Chaque grain possède donc 12 systèmes de glissement facile (plans de type  $\{111\}$  et directions de glissement de type  $\langle 110 \rangle$ ). Les lois de comportement viscoplastiques sont décrites sur chacun des 12 systèmes de glissement, en termes de cission résolue et de vitesse de glissement plastique. Elles se caractérisent par une contrainte de référence (sans seuil), une loi d'écoulement en sinus hyperbolique et une loi d'écrouissage distinguant auto-écrouissage et écrouissage latent (Héraud (1998)). Les calculs ont été effectués grâce au logiciel de calcul par éléments finis Cast3m (Cast3m (2006)). Des procédures d'intégration des lois de comportement élasto-viscoplastiques cristallines issues des travaux de (Héraud (1998)) ont été implantées dans Cast3m. Le maillage est sollicité en traction uniaxiale, en déplacements imposés (selon l'axe  $x$ ). Plus de détails sur la méthodologie sont donnés dans Sauzay *et al.* (2006) et Sauzay (2007).

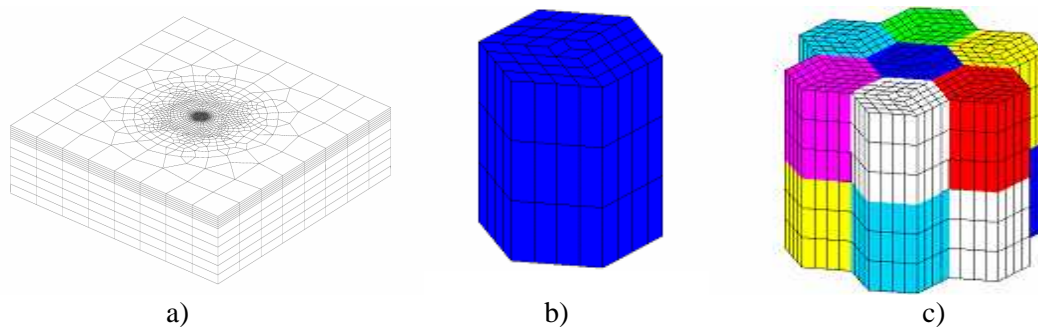


FIG. 1 – Maillages a) de la matrice; b) du grain isolé en surface de la matrice (distribution inter-orientations); c) du petit agrégat cristallin (le grain central, d'orientation donnée, est entouré de grains voisins d'orientations aléatoires, distribution intra-orientation).

Les coefficients de la loi de viscoplasticité cristalline sont identifiés par méthode inverse de manière à reproduire fidèlement le comportement macroscopique grâce à un calcul EF sur un grand polycristal sans texture composé de grains de géométrie cubique (FIG. 2 a)). En utilisant de plus l'hypothèse d'élasticité cubique, deux jeux de paramètres cristallins sont obtenus ; ils permettent de simuler soit la courbe de traction monotone (FIG. 2 b)) soit la courbe d'écrouissage cyclique (FIG. 2 c)). L'objectif est d'évaluer l'effet du durcissement du matériau. Les modules plastiques macroscopiques valent respectivement 5 et 27 GPa. L'effet de la viscosité étant très faible, notre étude revient à celle de l'influence de la plasticité cristalline.

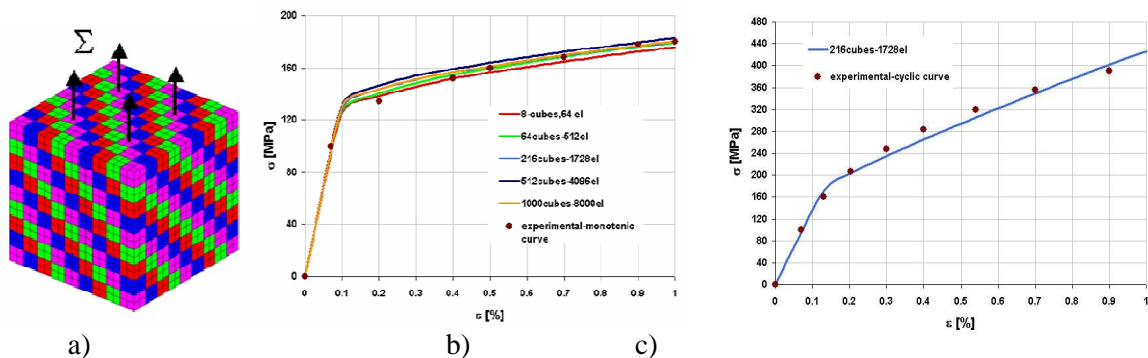


FIG. 2 – Identification des paramètres de la loi de viscoplasticité cristalline : a) maillage du polycristal utilisé pour l'identification inverse des paramètres de l'acier AISI 316LN à 550°C (Sauzay *et al.* (2004)); comparaison entre courbes macroscopiques expérimentales et simulées : b) traction monotone (faible durcissement), c) écrouissage cyclique (durcissement prononcé).

### 3 Résultats

Les distributions des valeurs moyennes par grain sont étudiées en termes de fonctions de distributions des facteurs de Schmid effectifs (rapport entre la cission résolue maximale et la contrainte axiale macroscopique) (Sauzay (2007)), en termes de contraintes axiales ou en termes de glissements plastiques primaires.

#### 3.1 Dispersion inter-orientations (modèle grain-matrice)

La FIG. 3 a) donne l'évolution des fonctions de distribution de facteurs de Schmid effectifs en fonction de la déformation macroscopique appliquée, obtenues avec les paramètres de (visco)plasticité cristalline caractéristiques de la courbe de traction monotone, avec l'hypothèse soit d'élasticité isotrope soit d'élasticité cubique (anisotrope) de l'austénite. Dans le régime des faibles déformations appliquées, l'élasticité cubique caractéristique de l'austénite induit un décalage des fonctions de distributions vers les faibles valeurs de facteur de Schmid. Ceci est en grande partie dû aux faibles valeurs du module d'Young dans les grains bien orientés. Puis, à des déformations plus élevées, l'effet de la plasticité devient de plus en plus prononcé et se caractérise par un décalage toujours vers les faibles valeurs des facteurs de Schmid effectifs, quelles que soient les caractéristiques élastiques. Dans le cas du matériau le plus ductile, l'effet de l'anisotropie élastique disparaît dès que la déformation appliquée atteint  $2.10^{-3}$ . Les évolutions obtenues sous écrouissage cyclique sont qualitativement les mêmes mais la distinction entre les courbes obtenues en élasticité soit isotrope soit cubique demeurent même pour une déformation appliquée de 1% (FIG. 3 b)).

Les amplitudes des distributions des contraintes axiales dans la configuration inter-orientation sont représentées FIGS. 4 a) et b) en fonction de la déformation appliquée. De nouveau l'effet d'anisotropie élastique devient négligeable au-delà de respectivement 0.2% et 1% selon le comportement modélisé (monotone ou cyclique). Si l'élasticité cubique de l'austénite est prise en compte, alors, quel que soit le comportement d'écrouissage, les amplitudes des distributions en configuration inter-orientations sont plus élevés dans le régime des faibles déformations qu'à plus forte déformation.

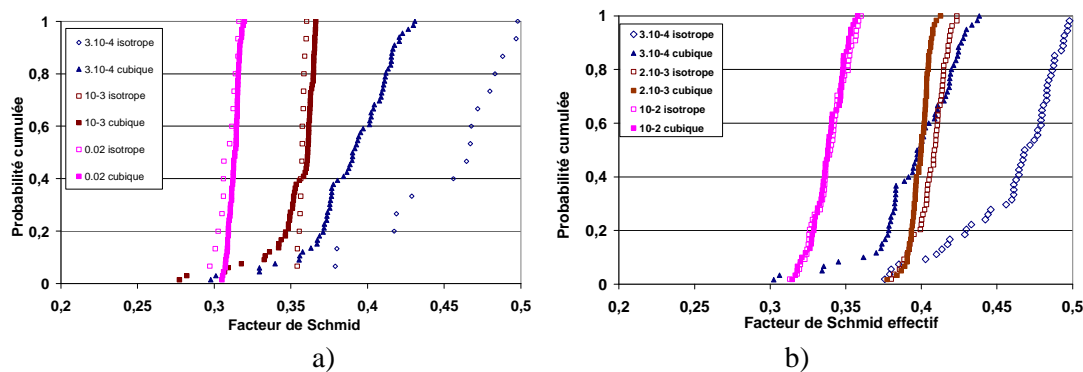


FIG. 3 – Fonctions de distribution des facteurs de Schmid effectifs (rapports entre contrainte résolue moyenne des grains et contrainte macroscopique de traction) sous hypothèse d'élasticité isotrope ou anisotrope. Configuration inter-orientations avec écrouissage: a) monotone ; b) cyclique.

#### 3.2 Dispersion intra-orientations (modèle avec grains voisins)

Les distributions intra-orientations obtenues pour les 5 orientations caractéristiques étudiés sont relativement proches et suivent des évolutions globalement similaires. Nous commentons donc uniquement les résultats obtenus pour les grains bien orientés de type B. L'influence des lois élastiques devient négligeable au-delà des mêmes déformations que mentionnées pour les

distributions inter-orientations (FIGS. 5 a) et b)). Quelque soient les lois cristallines modélisées, les amplitudes des distributions intra-orientations sont au moins égales à celles des distributions inter-orientations (FIGS. 4 a) et b)). A forte déformation, la distribution inter-orientation présente même une amplitude deux fois plus faible que la distribution intra-orientation.

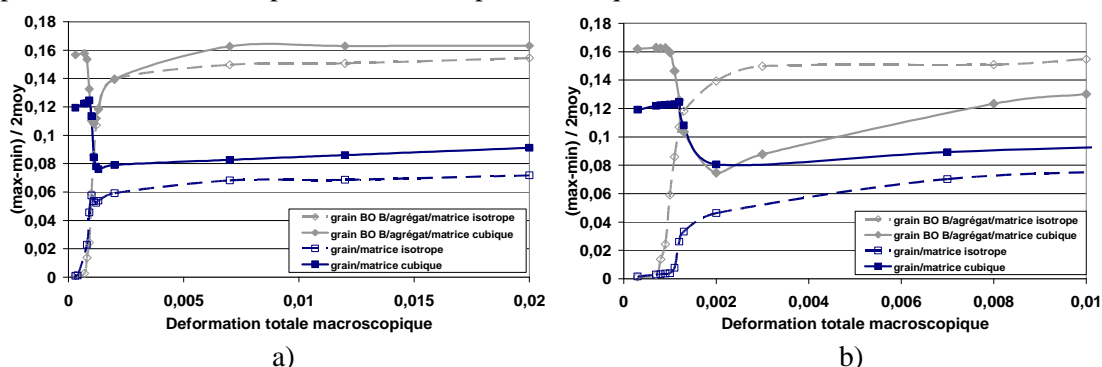


FIG. 4 – Amplitudes relatives des distributions des contraintes axiales moyennes par grain sous hypothèse d'élasticité isotrope ou anisotrope. Comparaison entre configurations inter-orientations et intra-orientation (grains bien orientés avec grains voisins d'orientations aléatoires). Ecouissage a) monotone ; b) cyclique.

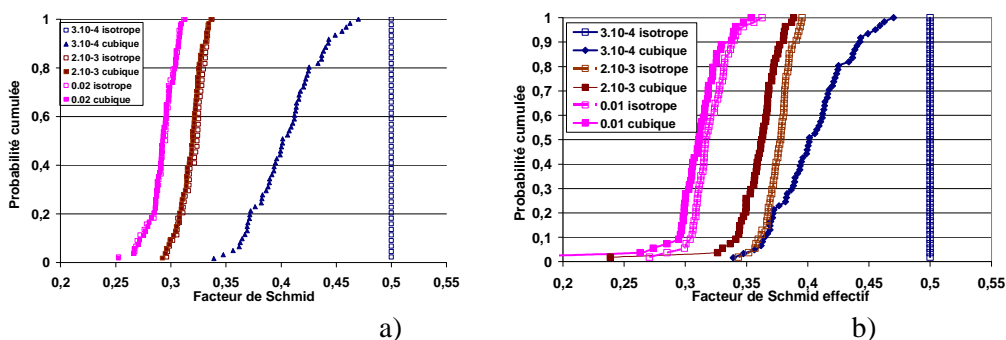


FIG. 5 – Fonctions de distribution des facteurs de Schmid effectifs sous hypothèse d'élasticité isotrope ou anisotrope. Configuration intra-orientation (grain central bien orienté), écouissage: a) monotone ; b) cyclique.

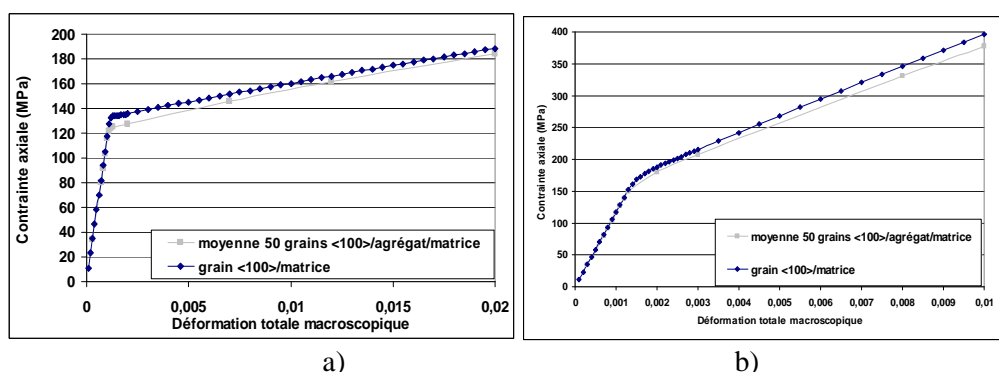


FIG. 6 – Prédictions obtenues avec d'une part un modèle grain-matrice et d'autre part en moyennant la distribution intra-orientation obtenue avec un grain de type  $\langle 100 \rangle$ . a) Comportement (visco)plastique monotone; b) Courbe d'écrouissage cyclique.

Les FIGS. 6 a) et b) donnent les évolutions des contraintes moyennes des grains d'orientations  $\langle 100 \rangle$ , en comportement monotone ou cyclique. Les évolutions sont obtenues soit par un

classique calcul grain <100>/matrice (FIGS. 1 a), b)) ou soit par calcul de la moyenne sur 50 configurations grain <100>/grains d'orientations aléatoires/matrice (FIGS. 1 a), c)).

#### 4 Discussion et conclusions

Cette étude par éléments finis 3D vise à évaluer les dispersions des champs mécaniques dans des grains à la surface d'un polycristal d'acier inoxydable austénitique type AISI 316L dans des configurations inter- et intra-orientation. Le comportement des grains est fondé d'une part sur l'élasticité cubique (anisotropie prononcée de l'austénite comparée à l'isotropie) et d'autre part sur la plasticité des cristaux CFC (écrouissages monotone et cyclique).

Les résultats suivants sont obtenus :

- les dispersions obtenues en régime purement élastique sont du même ordre que celles obtenues en régime élasto-plastique (déformations macroscopiques de 1% à 2%). L'effet de la plasticité cristalline est sensible dès une déformation macroscopique de 0.1%. Mais l'influence de l'anisotropie élastique cristalline est notable jusqu'à une déformation de 0.2% en monotone et 1% en cyclique. L'élasticité cubique ne peut pas être négligée dans l'étude de la fatigue.

- les distributions en configuration intra-orientation sont aussi dispersées qu'en configuration inter-orientations

- les contraintes axiales obtenues dans un grain d'orientation donnée, obtenues soit grâce à un calcul en configuration grain-matrice (absence de grain voisin), soit en calculant la moyenne sur tous les grains de cette même orientation mais de voisins différents sont très proches en régime purement élastique mais différent en régime élasto-(visco)plastique. L'effet sur les glissements (visco)plastiques est encore plus prononcé que sur la contrainte locale.

Ces résultats mettent en évidence les limitations du caractère prédictif des modèles de type grain-matrice dans le domaine de l'endommagement des polycristaux (fatigue, clivage...).

#### Références

Cailletaud, G., Forest, S., Jeulin, D., Feyel, F., Galliet, I., Mounoury, M., Quilici, S. 2003 Some elements of microstructural mechanics. *Computational Materials Science* 27, 351-374.

Cast3m, 2006, <http://www-cast3m.cea.fr>

Héraud, S. 1998 Du polycristal au multicristal : élaboration d'un mésoscope numérique pour une analyse locale en élastoplasticité. Thèse, Ecole Polytechnique.

Huntington, H.B. 1958 The elastic constants of crystals. In *Solid State Physics*, vol. 7 (ed. F. Seitz & D. Turnbull), pp. 217-351. Academic Press Incorporation Publishers. New-York.

Lebensohn, R.A., Liu, Y., Ponte Castaneda, P. 2004 On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations. *Acta Materialia* 52, 5347-5361.

Sauzay, M., Mottot, M., Allais, L., Noblecourt, M., Monnet, I., Périnet, J. 2004 Creep-fatigue of an AISI stainless steel at 550°C. *J. of Nuclear Engineering and Design* 232, 219-236.

Sauzay, M., Jourdan, Th. 2006 Polycrystalline microstructure, cubic elasticity and nucleation of high-cycle fatigue short cracks. *Int. Journal of Fracture* 141, 431-446.

Sauzay, M. 2007 Cubic elasticity and stress distribution at the free surface of polycrystals. *Acta Mater* 55, 1193-1202.