

Etudes numériques des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue

S. Basseville, Y. Guilhem, H. Proudhon, G. Cailletaud

UVSQ, LISV, Versailles

2 Avril 2013



Sommaire

Motivation

Loi de comportement

Variables étudiées

Simulations numériques : Modèle 3D « réel »

- Reconstruction d'agrégats 3D « réels »

- Maillage et conditions de chargements

- Fissure intragranulaire F30

- Fissure intra-granulaire F03

Simulation numérique : Modèle 3D « synthétique » : Influence de la rugosité

- Génération des surfaces et des maillages rugueux.

- Résultats

Conclusion

Motivation de l'étude

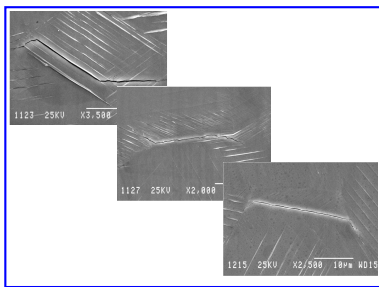
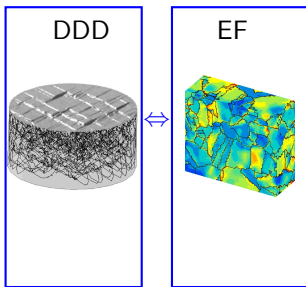
Projet AFGRAP :

- ▶ Apporter des éléments pour la modélisation des premiers stades d'amorçage et de propagation d'une fissure de fatigue dans un polycristal métallique.
- ▶ Mieux cerner le rôle de la microstructure dans l'amorçage en fatigue
- ▶ Développer un critère d'amorçage à l'échelle du grain

Calcul Numérique



Observation expérimentale



Sommaire

Motivation

Loi de comportement

Variables étudiées

Simulations numériques : Modèle 3D « réel »

Reconstruction d'agrégats 3D « réels »

Maillage et conditions de chargements

Fissure intragranulaire F30

Fissure intra-granulaire F03

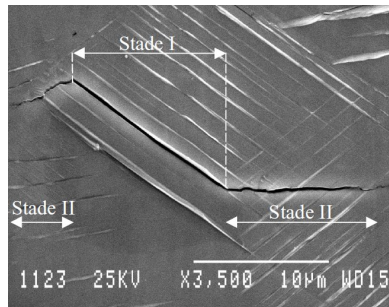
Simulation numérique : Modèle 3D « synthétique » : Influence de la rugosité

Génération des surfaces et des maillages rugueux.

Résultats

Conclusion

L'acier 316L



- ▶ Acier 316L : constitué de grains austénitiques (réseau CFC)
- ▶ Anisotropie élastique : Matrice d'élasticité de type cubique
- ▶ Anisotropie plastique : Loi de comportement phénoménologique monocristalline

Modèle de plasticité cristalline [Meric-Cailletaud-91]

Cisaillement : $\tau^s = \sigma : \mathbf{m}^s$

$$\mathbf{m}^s = \frac{1}{2} \left\{ \left(\vec{l}^s \otimes \vec{n}^s \right) + \left(\vec{n}^s \otimes \vec{l}^s \right) \right\}$$

Loi d'écoulement : $\dot{\varepsilon}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \mathbf{m}^s$

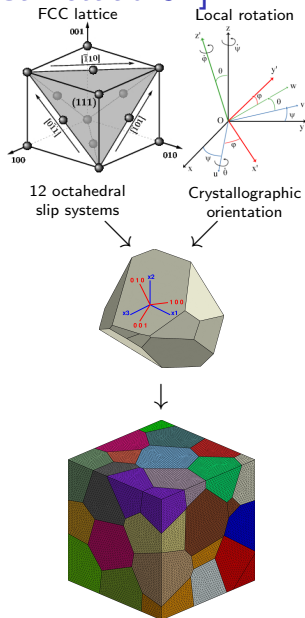
$$\dot{\gamma}^s = \text{sign}(\tau^s - x^s) \dot{\nu}^s$$

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

Lois d'écrouissage cinématique et isotrope :

$$x^s = c\alpha^s \quad \dot{\alpha}^s = \left(\text{sign}(\tau^s - x^s) - d\alpha^s \right) \dot{\nu}^s$$

$$r^s = bQ \sum_r h_{sr} \rho^r \quad \dot{\rho}^s = (1 - b\rho^s) \dot{\nu}^s$$



Paramètres identifiés pour l'acier 316L

[Huntington. H.B, 1958]

Loi	Élasticité cubique		
Paramètre	C_{1111}	C_{1122}	C_{1212}
Valeur	197000	125000	122000
Unité	MPa	MPa	MPa

[Guilhem. Y, 2013]

Loi	Plasticité cristalline						
Paramètre	τ_0	K	n	Q	b	c	d
Valeur	40	12	11	10	3	40000	1500
Unité	MPa	$\text{MPa}\cdot\text{s}^{-n}$		MPa		MPa	

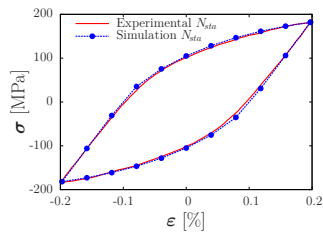
[Monnet. G, 2009, Queyreau. S, 2009, Gérard. C, 2008]

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

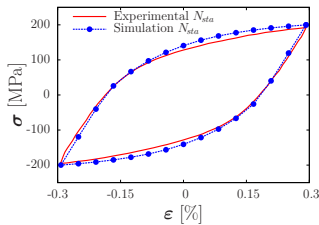
Résultats de l'identification

Données expérimentales : 316L CLI (EDF & DGA, [Barreau, 2000])

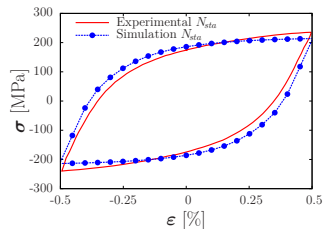
$\Delta\varepsilon/2 = 0.2\%$



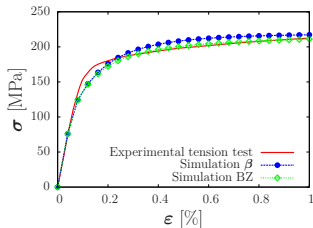
$\Delta\varepsilon/2 = 0.3\%$



$\Delta\varepsilon/2 = 0.5\%$



Tension $\varepsilon = 1.0\%$



Sommaire

Motivation

Loi de comportement

Variables étudiées

Simulations numériques : Modèle 3D « réel »

- Reconstruction d'agrégats 3D « réels »

- Maillage et conditions de chargements

- Fissure intragranulaire F30

- Fissure intra-granulaire F03

Simulation numérique : Modèle 3D « synthétique » : Influence de la rugosité

- Génération des surfaces et des maillages rugueux.

- Résultats

Conclusion

Variables étudiées (1/3)

- ▶ $\sum \gamma_{cum}$: la somme des glissements cumulés, liée à la densité de dislocations.
- ▶ ε_{mises}^P : la déformation plastique équivalente au sens de von Mises.

$$\varepsilon_{mises}^P = \sqrt{\frac{2}{3} \underline{\underline{\varepsilon}}^P : \underline{\underline{\varepsilon}}^P} \quad (1)$$

- ▶ σ_{mises} : la contrainte équivalente au sens de von Mises.

$$\sigma_{mises} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{\underline{\mathbf{s}}} : \underline{\underline{\mathbf{s}}}} \quad \text{avec } \underline{\underline{\mathbf{s}}} = \text{dev } \underline{\underline{\sigma}} \quad (2)$$

- ▶ σ_{triax} : le taux de triaxialité, témoin de la multiaxialité locale et moteur de la rupture ductile à une échelle macroscopique.

$$\sigma_{triax} = \frac{\text{Tr } \underline{\underline{\sigma}}}{3\sigma_{mises}} \quad (3)$$

Variables étudiées (2/3)

- ▶ N_γ : le nombre de systèmes de glissements actifs. On considère qu'un système S est actif ssi $\dot{\nu}^S > \frac{1}{100} \max_s \dot{\nu}^s$ et $\dot{\nu}^S > 1 \times 10^{-4} \text{s}^{-1}$.
- ▶ γ_{surf} et \vec{l}_{surf} : Indicateur de la hauteur et de l'orientation des intrusions et extrusions en surface.

$$\gamma_{\text{surf}}^P = \left(\sum_{s \in P} \gamma^s \vec{l}^s \right) \cdot \vec{n}_{\text{surf}} \quad (4)$$

$$\gamma_{\text{surf}} = \max_P (|\gamma_{\text{surf}}^P|) \times \text{sign}(\gamma_{\text{surf}}^P) \quad (5)$$

$$\vec{l}_{\text{surf}} = \frac{\vec{n}_{\text{surf}} \times \vec{n}(\gamma_{\text{surf}})}{\left| \vec{n}_{\text{surf}} \times \vec{n}(\gamma_{\text{surf}}) \right|} \quad (6)$$

où P désigne un plan de glissement ($P=1, \dots, 4$), s un système de glissement générique du plan P et \vec{n}_{surf} la normale à la surface et où $\vec{n}(\gamma_{\text{surf}})$ est la normale au plan qui correspond à γ_{surf} .

Variables étudiées (3/3)

- ▶ $\gamma_{cum}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots$: l'activité du glissement plastique cumulé en fonction du facteur de Schmid macroscopique permettant d'obtenir des cartographies du glissement sur le système primaire (1) et secondaire (2) de tous les grains de l'agrégat.
- ▶ $|\tau^1|/\sigma_{macro}$: le rapport entre le système primaire (1) qui a le plus grand facteur de Schmid macroscopique et la contrainte macroscopique de traction.
- ▶ $|\tau^1|/|\tau^2|$: le rapport entre le système primaire (1) qui a le plus grand facteur de Schmid macroscopique et le système secondaire (2) qui a le deuxième facteur de Schmid macroscopique, témoin de la déviation apportée par l'aspect polycristal.
- ▶ $\gamma_{cum}^1/\gamma_{cum}^2$: le rapport entre le glissement cumulé sur le système primaire qui a le plus grand facteur de Schmid macroscopique 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.
- ▶ $\gamma_{cum}^{max}/\sum \gamma_{cum}$: le rapport entre le glissement maximal et la somme des glissements témoin de l'aspect tendance au glissement simple/multiple.

Sommaire

Motivation

Loi de comportement

Variables étudiées

Simulations numériques : Modèle 3D « réel »

Reconstruction d'agrégats 3D « réels »

Maillage et conditions de chargements

Fissure intragranulaire F30

Fissure intra-granulaire F03

Simulation numérique : Modèle 3D « synthétique » : Influence de la rugosité

Génération des surfaces et des maillages rugueux.

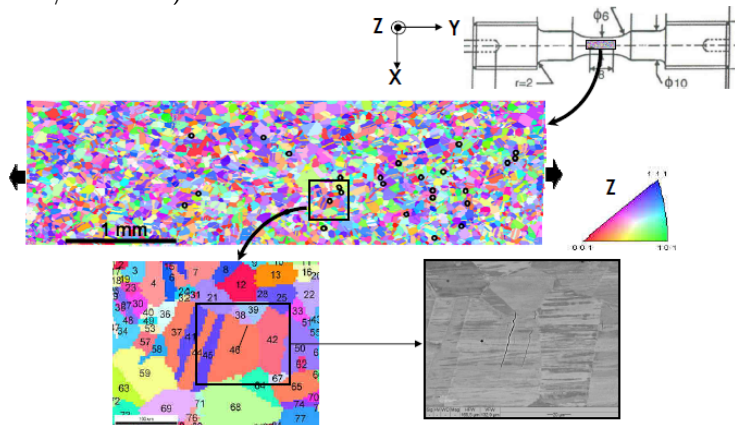
Résultats

Conclusion

Reconstruction d'agrégats 3D « réels »

Réalisé par l'institut *P'* : T. Ghidossi, L. Signor, P. Villechaise

Cartographie en surface de l'orientation d'un essai de fatigue (5000 cycles, $\Delta\varepsilon^P/2 = 0.2\%$)



29 séquences de polissages / EBSD / MEB

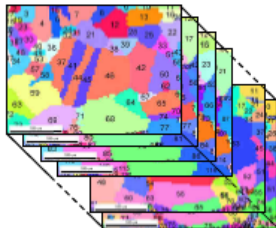
Profondeur / polissage : 3-5 μm ; Profondeur totale : 115 μm .

Reconstruction d'agrégats 3D « réels »

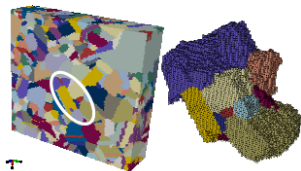
Principe : préparation d'une cartographie d'orientation 2D ; dimensionnement, nettoyage, alignement...



Empilement des différentes cartes 2D

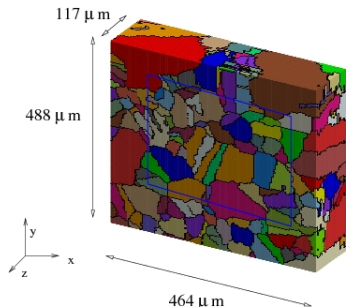


Identification des grains 3D
propriétés microstructurale (volume..)

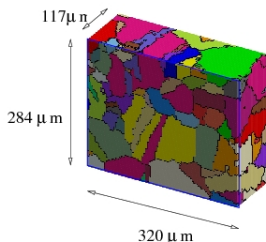


Maillage Elements Finis
Eléments hexaédriques

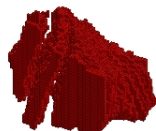
Maillages : Agregate_F30



crop3 : 386 grains, $\sim 609\,000$ éléments



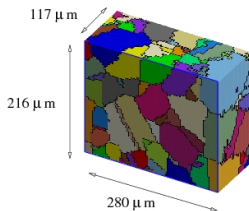
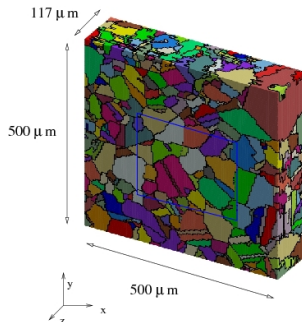
crop2 : 157 grains, $\sim 147\,000$ éléments



Grain central

- ▶ Taille d'éléments $4 \times 4 \times 3 \mu\text{m}$
- ▶ Éléments hexaédriques linéaires
- ▶ Intégration exacte

Maillages : Agregate_F03



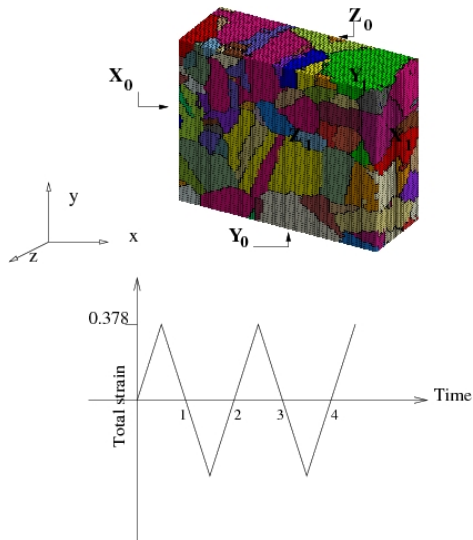
Grain central

crop3 : 1370 grains, \sim 609 000 éléments

crop2 : 233 grains, \sim 147 000 éléments

- ▶ Taille d'éléments $4 \times 4 \times 3 \mu\text{m}$
- ▶ Éléments hexaédriques linéaires
- ▶ Intégration exacte

Conditions de chargement

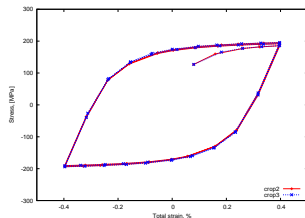
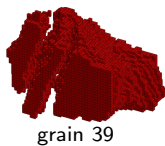
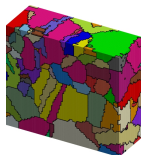
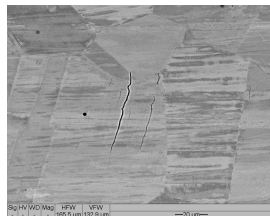


Conditions de chargement

- ▶ Faces cachées X_0 , Y_0 , Z_0 : Conditions de symétrie
- ▶ Surface Z_1 : Libre de contraintes
- ▶ Face X_1 : déplacement normal homogène cyclique donnant $\Delta\varepsilon/2 = 0.378$
- ▶ Face Y_1 : déplacement normal homogène réglé par un mpc

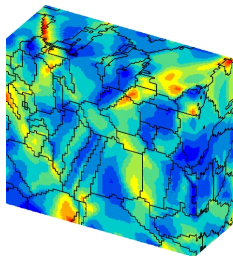
Simulation EF, F30 : Comportement macroscopique

Schmid	Système	Rang	Angle
0.498	C1	1	102°
0.454	B2	2	115°

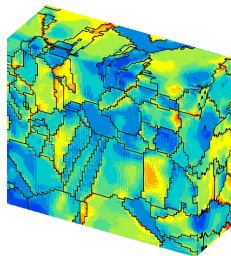


Contrainte moyenne, [MPa]	σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
Agrégat crop2	0	185.6	0	3.9	-0.95	0.21
Agrégat crop3	0	185.7	0	4.66	0.38	-0.43
Grain Fissuré crop2	-13.9	184	37.67	15.9	-5.7	12.8
Grain Fissuré crop3	-17.5	186.7	40.6	24.37	-6.8	11.64
Déformation moyenne, [%]	ϵ_{11}	ϵ_{22}	ϵ_{33}	ϵ_{12}	ϵ_{13}	ϵ_{23}
Agrégat crop2	-0.14	0.378	-0.219	-0.0064	0.021	0.00249
Agrégat crop3	-0.158	0.378	-0.19	0.001	-0.0006	-0.005
Grain Fissuré crop2	-0.12	0.411	-0.24	-0.059	0.047	-0.024
Grain Fissuré crop3	-0.118	0.411	-0.24	-0.044	0.043	-0.027

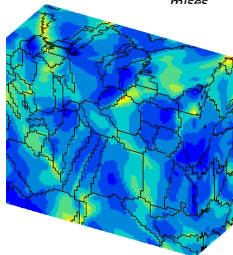
Simulation EF : F30, crop2



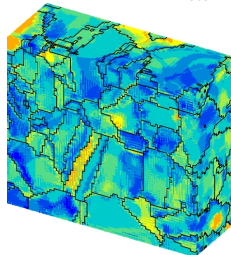
0.0 0.016

Isovaleurs de ε_{mises}^p 

100 375

Isovaleurs de σ_{mises} 

0.0 0.275

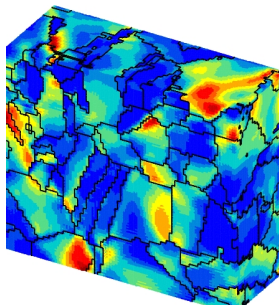
Isovaleurs de $\sum \gamma_{cum}$ 

0 12

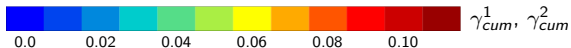
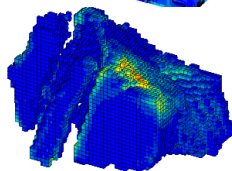
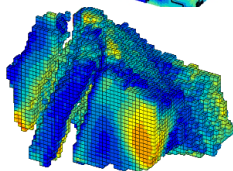
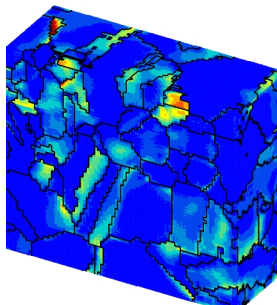
Nombre de systèmes de glissement actifs N_γ

Activité du glissement plastique cumulé, F30 crop2

Système primaire

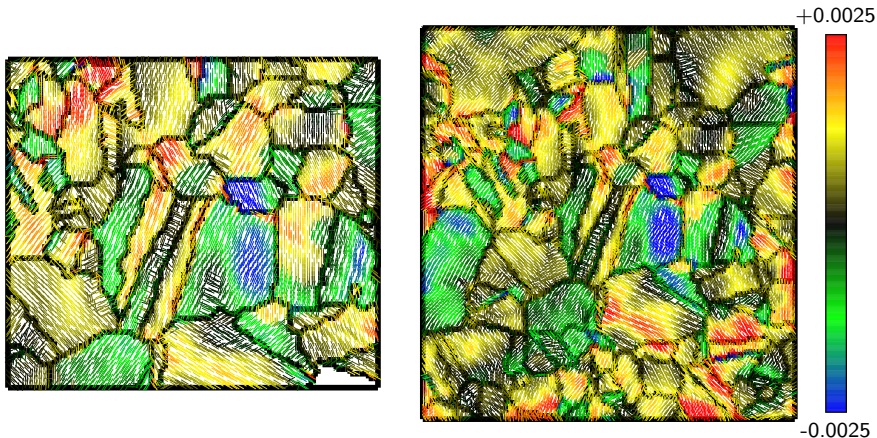


Système secondaire



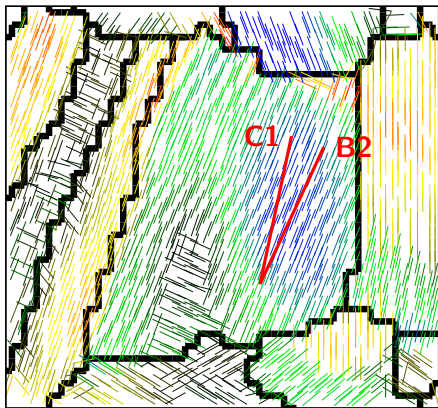
F30 crop2/crop3 : étude des intrusions/extrusions

→ Indicateur d'intensité et d'orientation des PSM sur la surface libre tracés à la fin du second cycle.

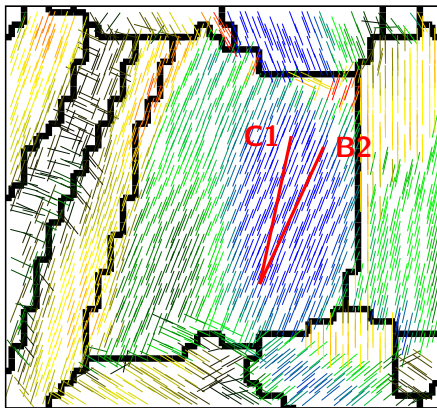


F30 crop2/crop3 : étude des intrusions/extrusions

→ Indicateur d'intensité et d'orientation des PSM sur la surface libre tracés à la fin du second cycle.



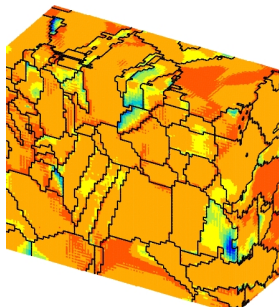
crop 2



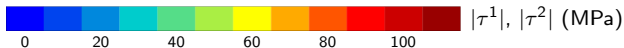
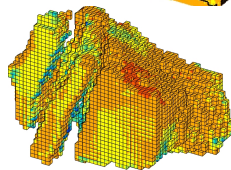
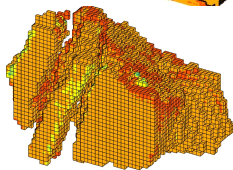
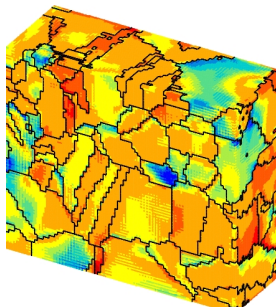
crop 3

Cisaillement dans les plans de glissement, F30 crop2

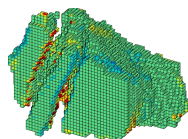
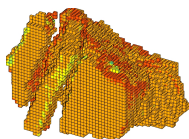
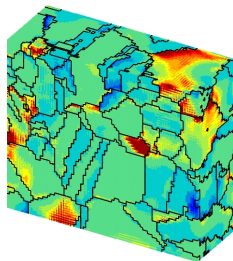
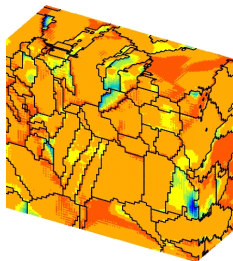
Système primaire



Système secondaire



Déviat° apportée par l'aspect polycristal et Glissement simple/multiple



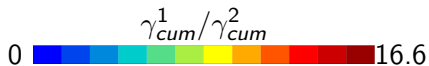
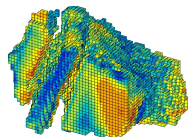
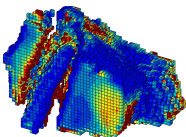
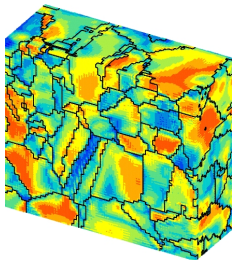
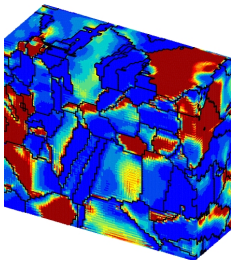
$$|\tau^1|/|\sigma_{macro}|$$

0 0.6

$$|\tau^1|/|\tau^2|$$

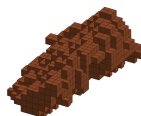
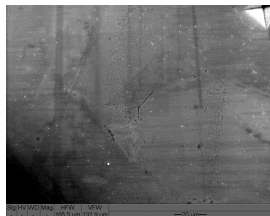
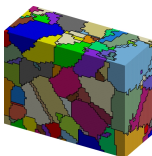
0 0.275

Glissement simple/multiple

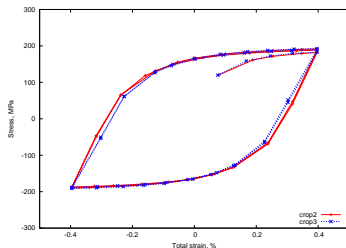


Simulation EF, F03 : Comportement macroscopique

Schmid	Système	Rang	Angle
0.469	B2	1	137°
0.359	C1	2	

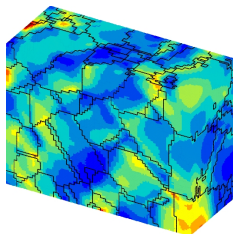


grain 19

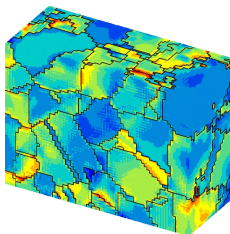


Contrainte moyenne, [MPa]	σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{12}	σ_{13}	σ_{23}
Agrégat crop2	0	182.0	0	-1.67	5.4	-0.6
Agrégat crop3	0	182.9	0	0.78	1.374	-0.71
Grain Fissuré crop2	-8.6	176	-21.56	4.95	30.51	-19.3
Grain Fissuré crop3	-9.84	174.	-18.3	8.57	28.5	-20.4
Déformation moyenne, [%]	ϵ_{11}	ϵ_{22}	ϵ_{33}	ϵ_{12}	ϵ_{13}	ϵ_{23}
Agrégat crop2	-0.169	0.378	-0.185	-0.007	-0.02	-0.01
Agrégat crop3	-0.191	0.378	-0.145	-0.005	-0.02	-0.008
Grain Fissuré crop2	-0.219	0.327	-0.07	-0.001	-0.028	0.007
Grain Fissuré crop3	-0.245	0.349	-0.007	0.017	-0.052	0.076

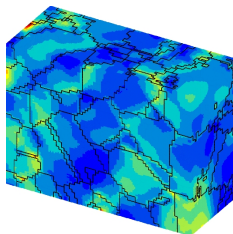
Simulation EF : F03, crop2



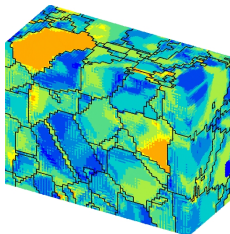
0.0  0.016
Isovaleurs de ε_{mises}^p



100  375
Isovaleurs de σ_{mises}



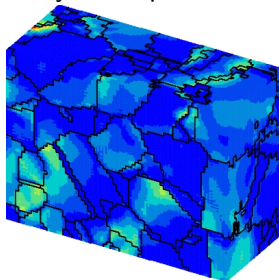
0.0  0.275
Isovaleurs de $\sum \gamma_{cum}$



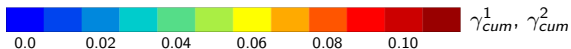
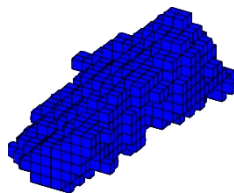
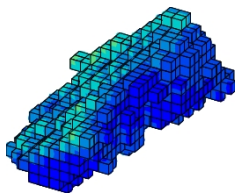
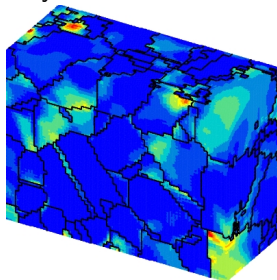
0  12
Nombre de systèmes de glissement actifs N_γ

Activité du glissement plastique cumulé, F03 crop2

Système primaire

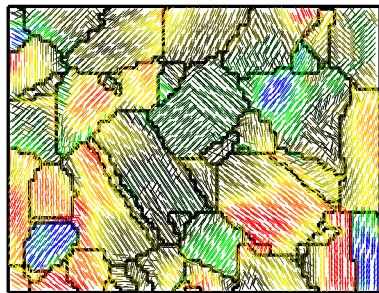


Système secondaire

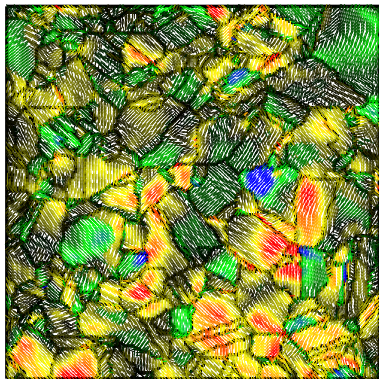


F03 crop2/crop3 : étude des intrusions/extrusions

→ Indicateur d'intensité et d'orientation des PSB sur la surface libre, tracé à la fin du second cycle.



crop 2



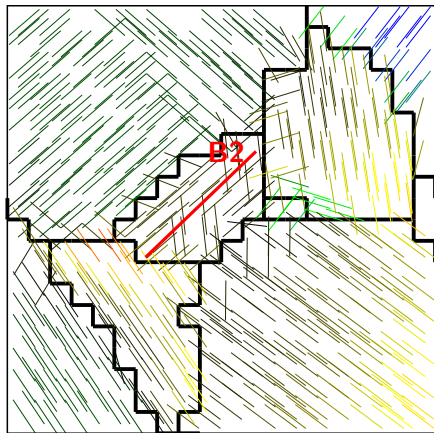
+0.0025

-0.0025

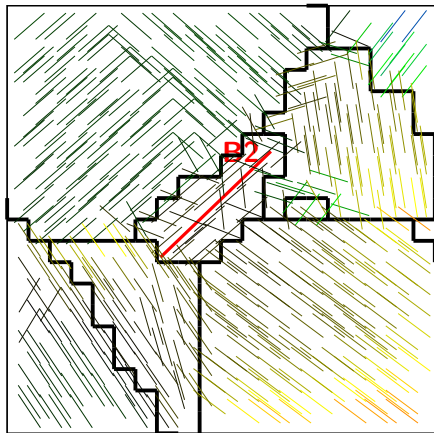
crop 3

F03 crop2/crop3 : étude des intrusions/extrusions

→ Indicateur d'intensité et d'orientation des PSB sur la surface libre, tracé à la fin du second cycle.



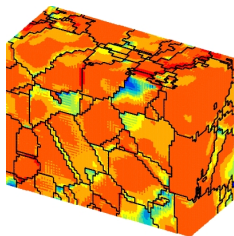
crop 2



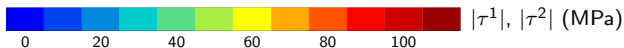
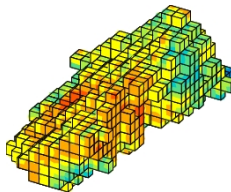
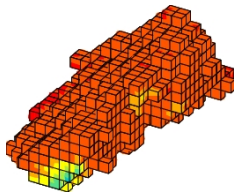
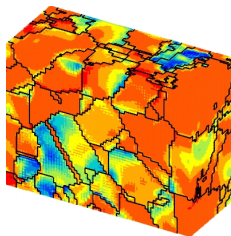
crop 3

Cisaillement dans les plans de glissement, F03 crop2

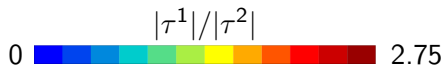
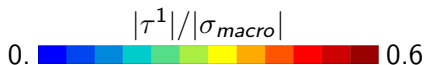
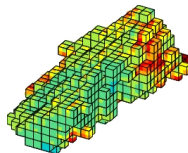
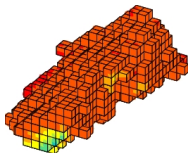
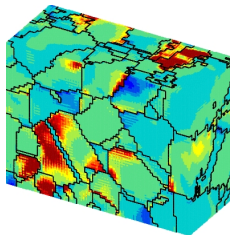
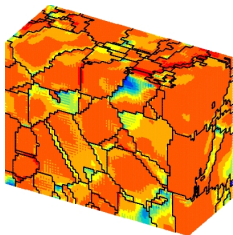
Système primaire



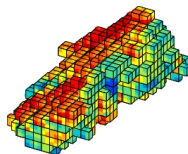
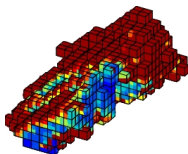
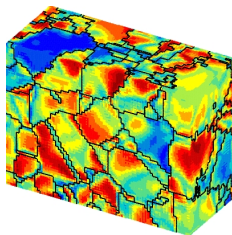
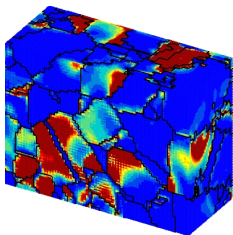
Système secondaire



Déviations apportées par l'aspect polycristal et Glissement simple/multiple



Glissement simple/multiple



$$\gamma_{cum}^1 / \gamma_{cum}^2$$

$$\gamma_{cum}^{max} / \sum \gamma_{cum}$$



Sommaire

Motivation

Loi de comportement

Variables étudiées

Simulations numériques : Modèle 3D « réel »

Reconstruction d'agrégats 3D « réels »

Maillage et conditions de chargements

Fissure intragranulaire F30

Fissure intra-granulaire F03

Simulation numérique : Modèle 3D « synthétique » : Influence de la rugosité

Génération des surfaces et des maillages rugueux.

Résultats

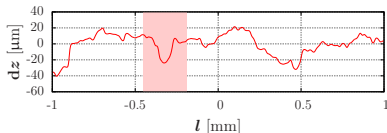
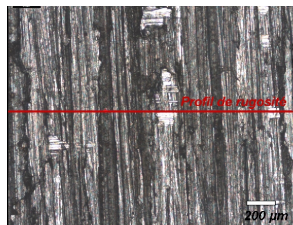
Conclusion

Caractérisation de la rugosité pour l'acier 304L

Quelles sont les effets de la rugosité sur la localisation de la déformation plastique ?

- ▶ 2 états de surface [Le Pêcheur, 2008] : brut (RRA) et brossé

Brut :



61.3 µm

11.1 µm

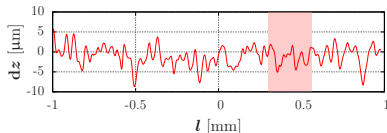
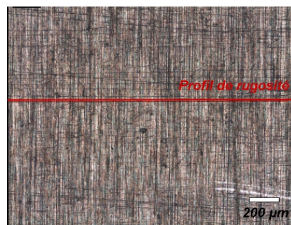
14.09 µm

R_t : hauteur de rugosité maximale

R_a : valeur moyenne

R_q : racine carrée moyenne

Brossé :



14.3 µm

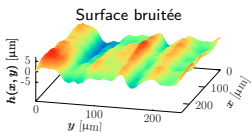
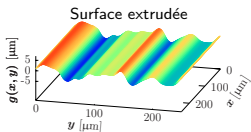
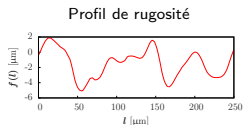
1.88 µm

2.38 µm

Méthode

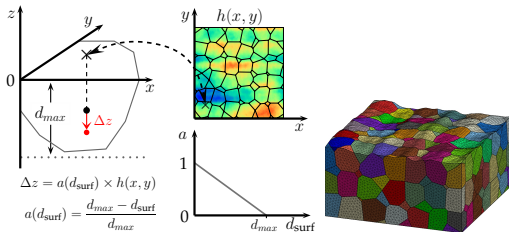
Génération des surfaces rugueuses

- ▶ Extension d'une partie de la représentation des profils
- ▶ Ajout d'une surface fractale de série régulière perturbée

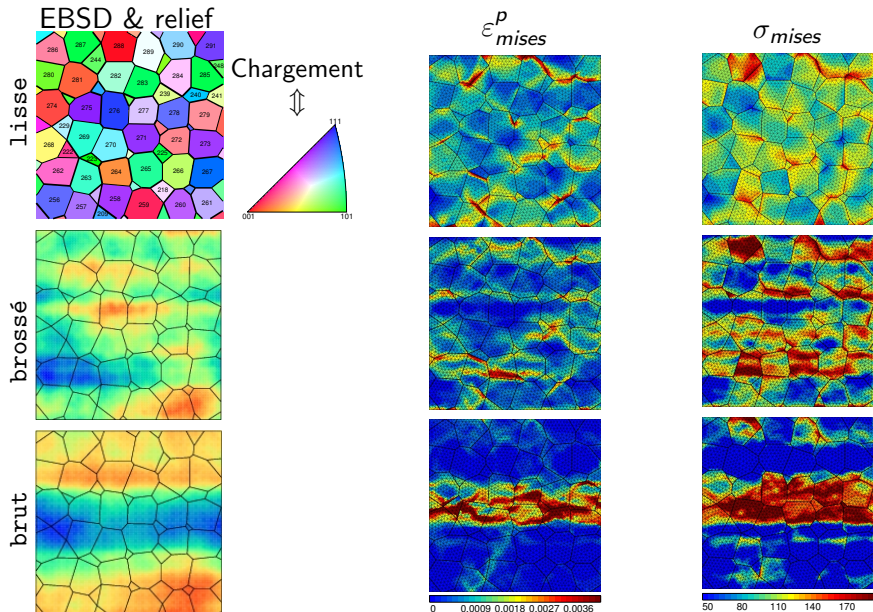


Application au maillage

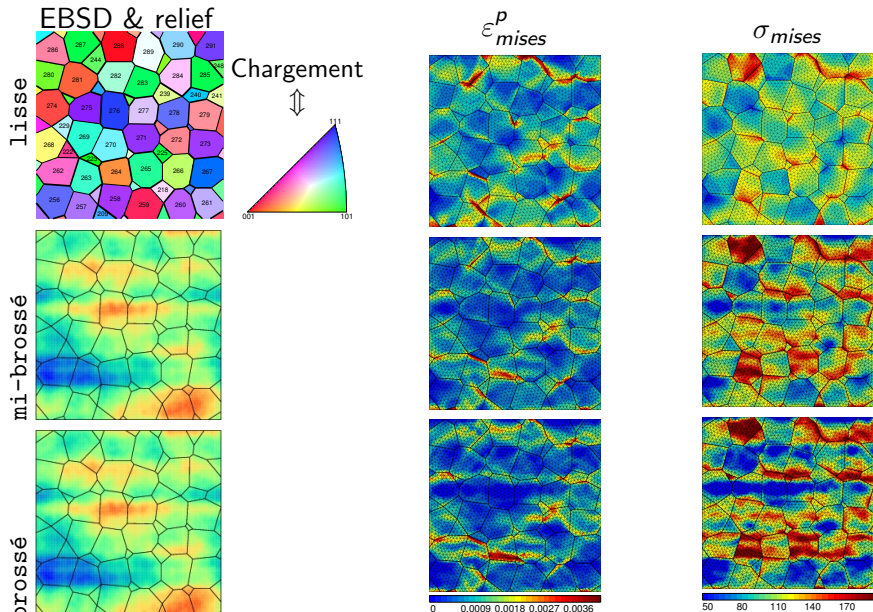
- ▶ Méthode de déplacement des noeuds
- ▶ Décroissance linéaire en profondeur



Influence du type de rugosité de surface



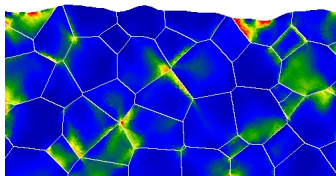
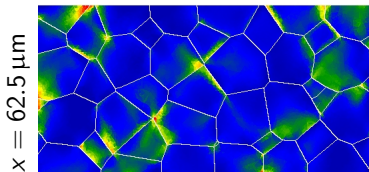
Influence de l'intensité de rugosité à la surface



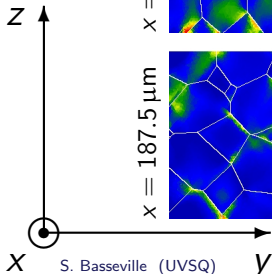
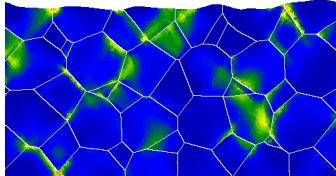
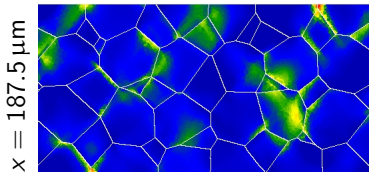
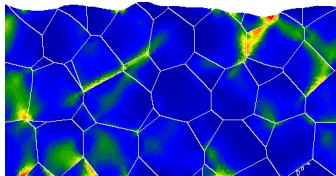
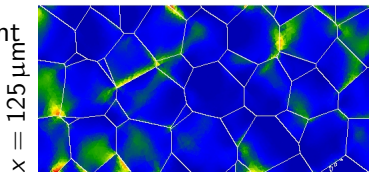
Vue en coupe des champs locaux $\sum \gamma_{cum}$

Lisse

Brossé



Chargement



Sommaire

Motivation

Loi de comportement

Variables étudiées

Simulations numériques : Modèle 3D « réel »

- Reconstruction d'agrégats 3D « réels »

- Maillage et conditions de chargements

- Fissure intragranulaire F30

- Fissure intra-granulaire F03

Simulation numérique : Modèle 3D « synthétique » : Influence de la rugosité

- Génération des surfaces et des maillages rugueux.

- Résultats

Conclusion

Conclusion

- ▶ Choix de l'agrégat : taille suffisamment grand → éviter les effets de conditions aux limites / capter au mieux les états de contrainte dans le grain.
- ▶ Prédiction des marches d'intrusion/extrusion : bon accord avec les observations expérimentales, pour les grains assez larges en surface.
- ▶ Développement de nouveaux outils de dépouillement pour déterminer le paramètre microstructural caractérisant l'amorçage de fissure :
 - ▶ τ^1 ou τ^2 : activité de glissement des systèmes primaire et secondaire ;
 - ▶ $|\tau^1|/|\sigma_{macro}|$: étude de la déviation apportée par l'aspect du polycristal ;
 - ▶ $|\tau^1|/|\tau^2|$, $\gamma_{cum}^1/\gamma_{cum}^2$, ou $\gamma_{cum}^{max}/\sum \gamma_{cum}$: étude de la tendance au glissement simple/multiple.
- ▶ Etude de l'influence de la rugosité : le creux des vallées sont des sites de localisation de déformation ; « compétition » entre rugosité et orientation cristallographique ; influence sur la première couche.



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