
Simulation des hétérogénéités de champs mécaniques en plasticité cristalline – Intégration d'une approche non locale

Julien Schwartz

Thèse BDI cofinancée CEA-EDF :

Étude de l'amorçage des fissures de fatigue oligocyclique dans les aciers IF et 316L par la théorie continue des dislocations intégrant les seconds gradients - Validations expérimentales

Encadrants :

Colette Rey (ECP-LMSSMat)

Olivier Fandeur (CEA)

François Curtit (EDF)

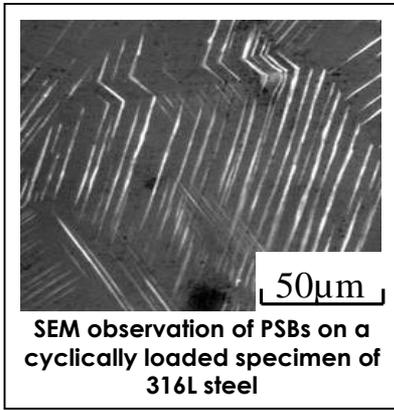
Sommaire

1. Phénomènes d'amorçage de fissures
2. Matériaux étudiés – microstructures
3. Travaux numériques
4. Conclusion et perspectives

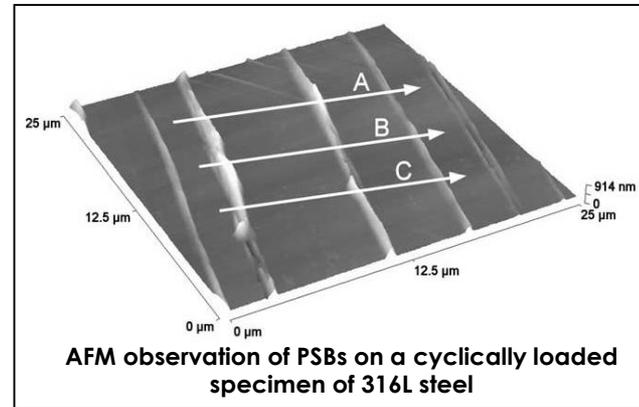
1. Phénomènes d'amorçage de fissures

Les fissures intragranulaires de fatigue sont liées à des phénomènes microstructuraux.

L'apparition de structures de dislocations particulières induit des hétérogénéités de déformations et semble dépendre de l'orientation cristalline des grains composant le matériau.



Man et al MSE A351 2003 123-132



Man et al MSE A351 2003 123-132

Pour des structures CFC, la déformation plastique est principalement absorbée par des Persistent Slip Bands (PSB). Ces régions de glissement intense génèrent en surface des intrusions et des extrusions au sein desquelles apparaissent les fissures de fatigue.

Objectif : étudier et modéliser ces hétérogénéités de déformation, signes précurseurs de l'apparition des fissures intragranulaires de fatigue

2. Matériaux étudiés – microstructures

• Acier IF (Interstitial Free)

Caractéristiques :

- Acier ferritique laminé à faible taux de carbone
- Structure cristalline Cubique Centrée (CC)

Composition (mesures issues du fondeur) :

Éléments	Fe	C	Mn	P	S	N	Si	Al	Ti
% en masse	base	0,003	0,15	0,007	0,007	0,003	0,007	0,02	0,06

Motivation du choix du matériau :

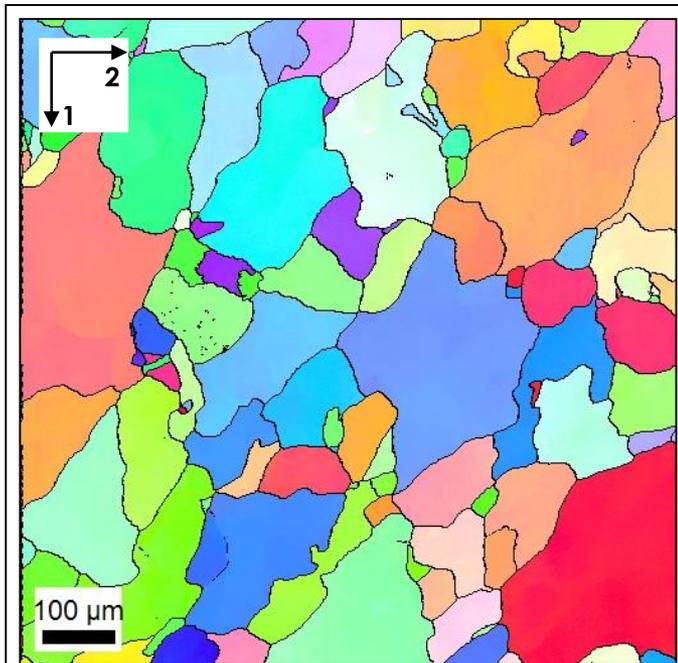
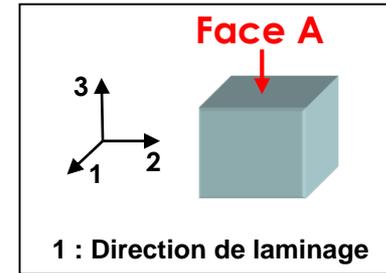
Matériau « modèle » ayant déjà fait l'objet d'une thèse au Laboratoire de Mécanique des Sols, Structures et Matériaux (Thèse de Philippe Eriéau 2003)

2. Matériaux étudiés – microstructures

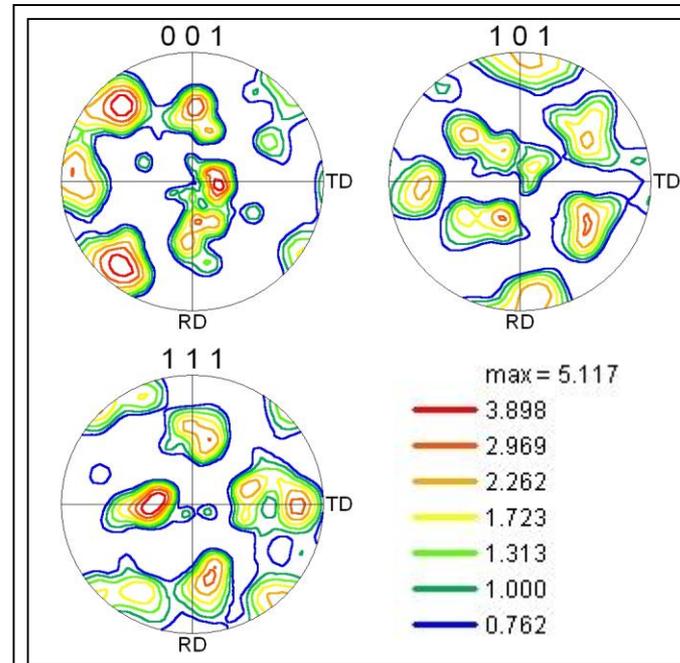
Acier IF (suite)

Analyse EBSD – 112 grains – 900 μm x 900 μm :

- Taille de grains hétérogène (moyenne 164 μm)
- Matériau non maclé
- Aucune texture



Cartographie EBSD selon 3 de la face A (polissage électrolytique acide oxalique)



Figures de pôle [0 0 1], [1 0 1] et [1 1 1]

2. Matériaux étudiés – microstructures

• Acier 316L

Caractéristiques :

- Acier austénitique inoxydable laminé
- Structure cristalline Cubique Face Centrée (CFC)

Composition (mesures issues du fondeur) :

Éléments	Fe	C	Mn	P	S	N	Si	Al	Ti
% en masse	base	0,003	0,15	0,007	0,007	0,003	0,007	0,02	0,06

Motivation du choix du matériau :

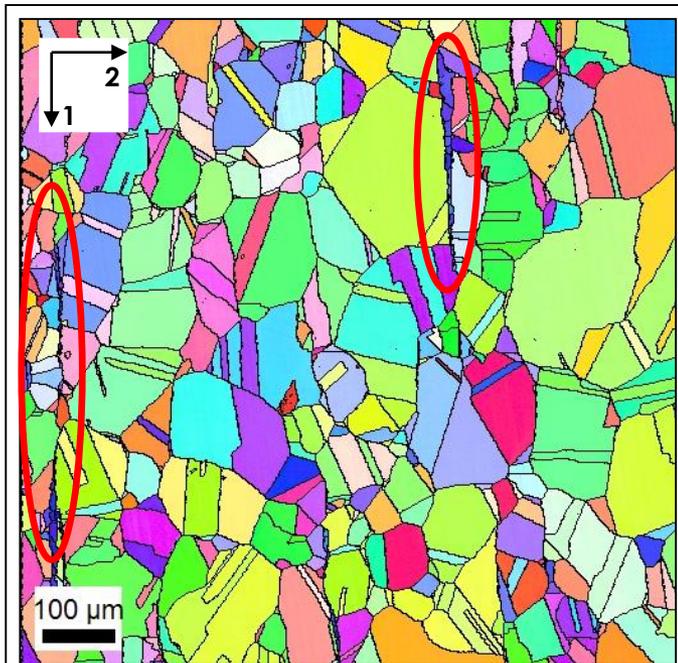
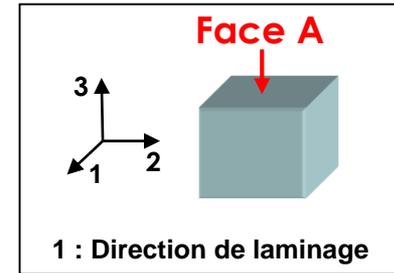
Matériau industriel fourni par EDF-Areva (problème d'apparition de fissures de fatigue au niveau des tuyauteries)

2. Matériaux étudiés – microstructures

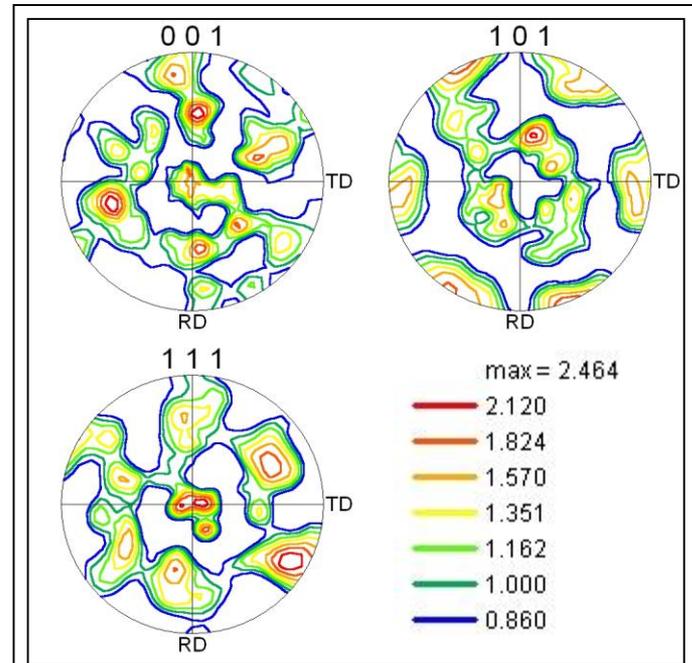
Acier 316L (suite)

Analyse EBSD – 556 grains – 900 μm x 900 μm :

- Présence de ferrite delta résiduelle
- Taille de grains moyenne 77 μm
- Matériau fortement maclé
- Aucune texture



Cartographie EBSD selon 3 de la face A
(polissage électrolytique acide oxalique)



Figures de pôle [0 0 1], [1 0 1] et [1 1 1]

3. Travaux numériques

- **Travaux envisagés**

Simulations de tests de fatigue sur agrégats 3D à l'aide du modèle CristalECP intégrant une approche non locale sur Cast3m™ et Abaqus™

Description :

- Réalisation d'agrégats 3D d'acier IF et d'acier 316L

 - **Représentatif du matériau au niveau du comportement mécanique (nombre suffisant de grains)**

 - **Décrivant la microstructure réelle du matériau (morphologie réelle des grains et orientations cristallines réelles)**

- Intégration de l'approche non locale dans le modèle CristalECP sur Cast3m™ et Abaqus™

 - **Prise en compte de la courbure du réseau cristallin**

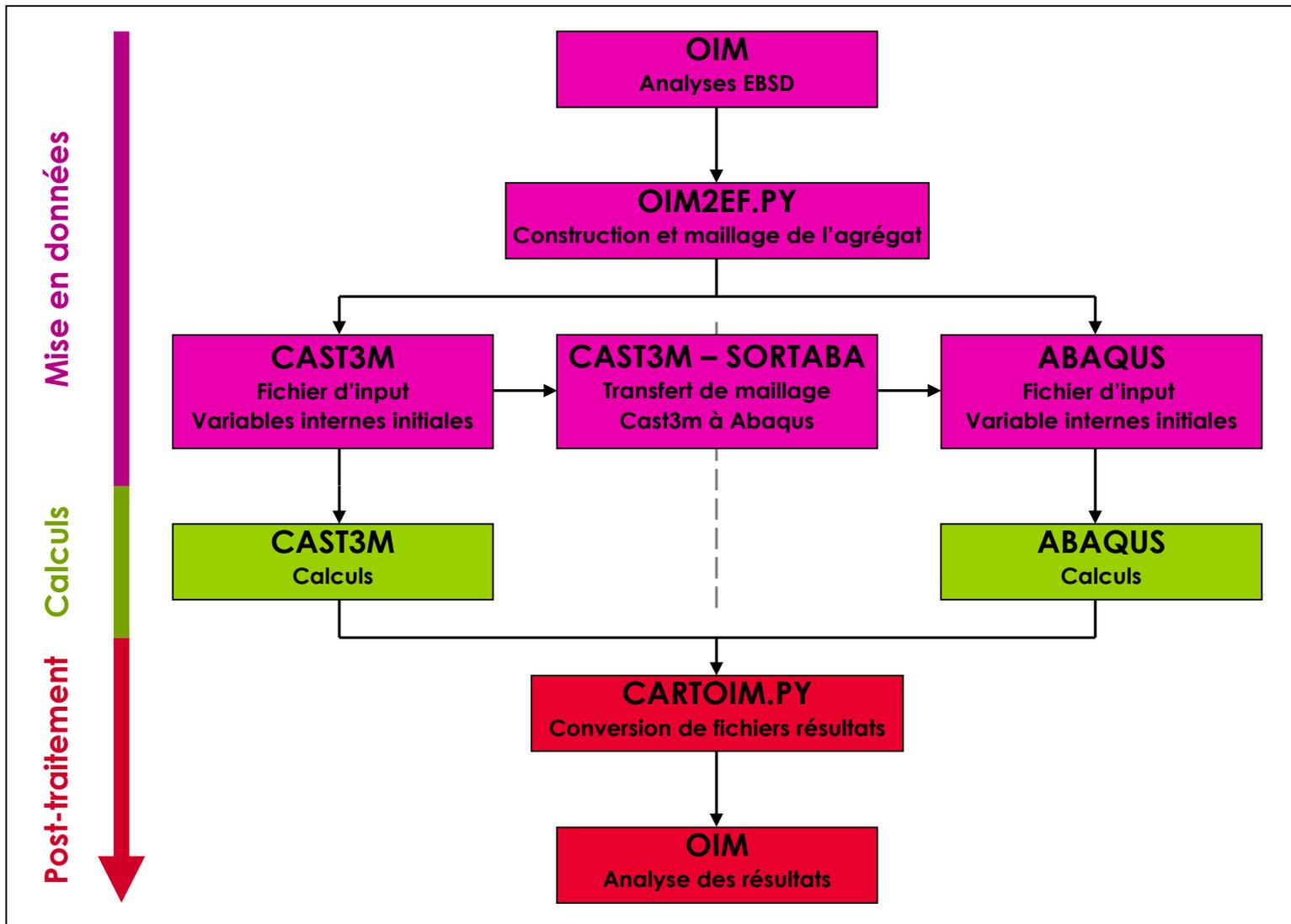
 - **Prise en compte de la taille grain**

 - **Plus grande précision des champs mécaniques calculés**

 - **Meilleure description de l'écrouissage cinématique**

3. Travaux numériques

• Principe des calculs

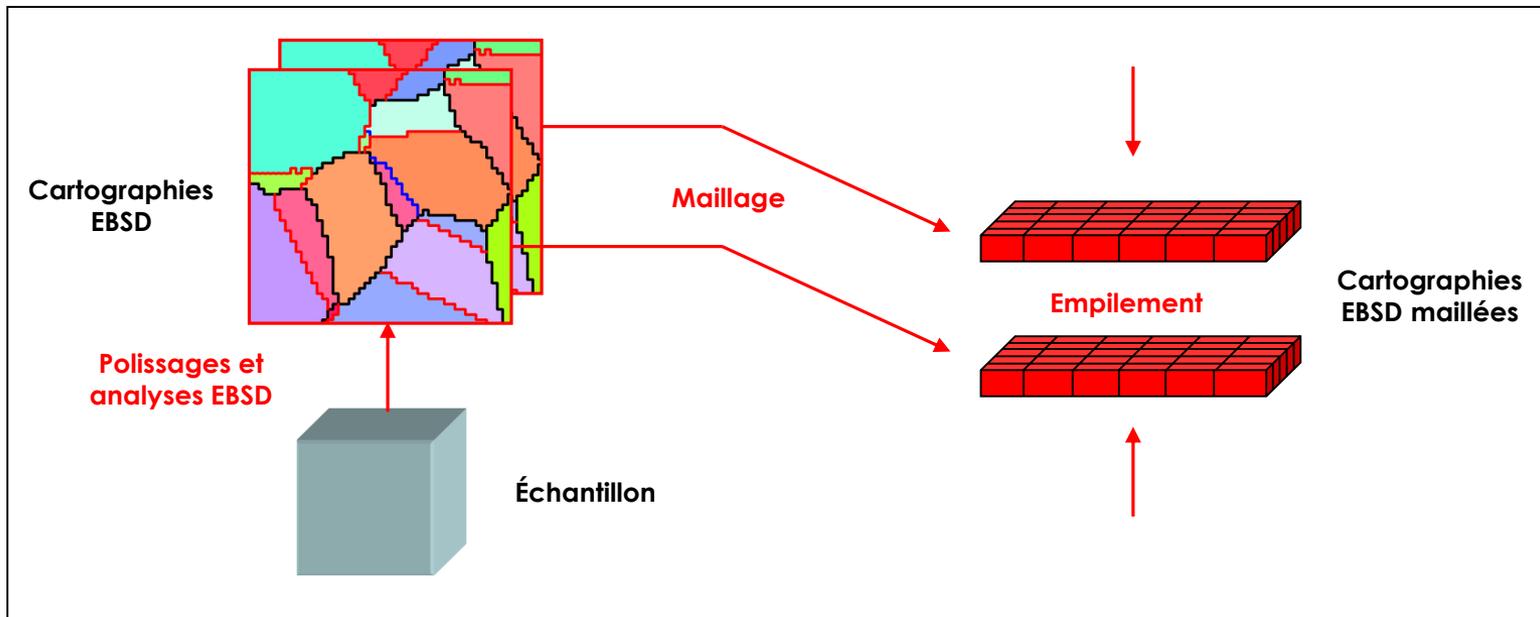


3. Travaux numériques

- Mise en données

Construction d'agrégats multicristallins :

- Polissages manuels successifs et cartographies EBSD
- Maillage de chaque cartographie EBSD représentant une couche de matériaux avec des éléments carrés
- Empilement des couches de matériau maillées
- Définition des propriétés matériau communes à tous les grains
- Définition des orientations cristallines associés à chaque grain



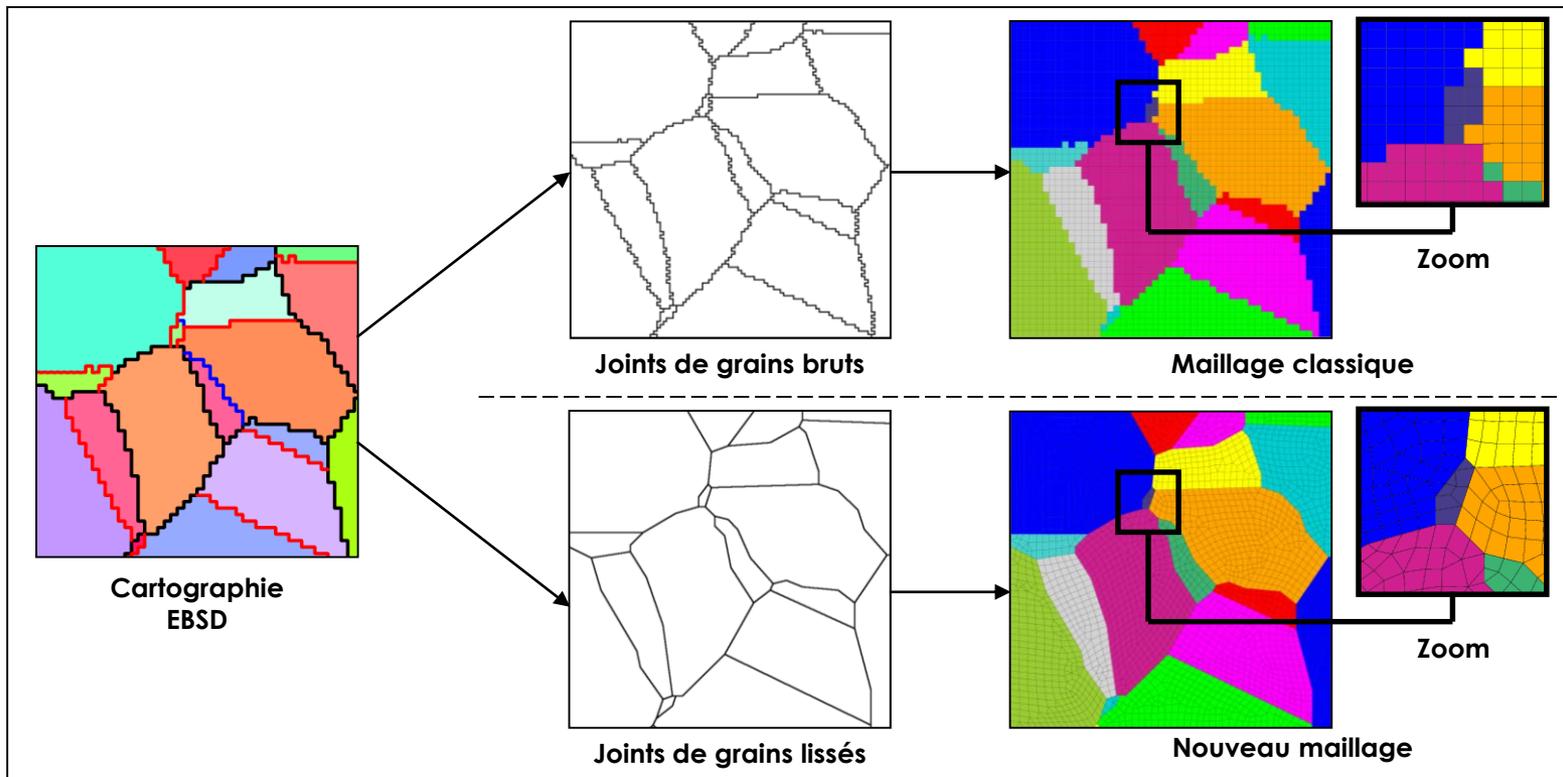
3. Travaux numériques

Inconvénient de cette méthode de construction :

Les joints de grain en escalier (EBSD et type d'élément) peuvent poser des problèmes numériques

Amélioration étudiée

Réalisation de joints de grains droits :



3. Travaux numériques

• Modèle CristalECP classique

Implémentation :

- Cast3m™ et Abaqus™
- Modèle écrit en grandes transformations ($F = F^e F^p$)

Loi du modèle :

- Critère de Schmid

$$|\tau^s| \geq \tau_c^s \text{ et } \dot{\tau}^s = \dot{\tau}_c^s$$

- Loi d'écroissage

$$\tau_c^s = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_t a^t \rho^t}$$

- Loi viscoplastique

$$\dot{\gamma}_0^s = \left| \frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right|^{n-1} \left(\frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right) \text{sgn}(\tau^s) \text{ si } |\tau^s| \geq \tau_c^s$$

$$\dot{\gamma}^s = 0 \text{ si } |\tau^s| < \tau_c^s$$

- Évolution de la densité de dislocations

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(\frac{1}{L^s} g_c \rho^s \right) \text{ avec } \frac{1}{L^s} = \frac{1}{D} + \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K}$$

- Évolution de la cission critique

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su} |\dot{\gamma}^u|$$

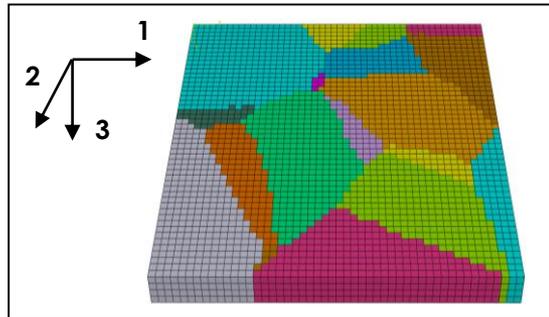
- Matrice d'écroissage

$$h^{su} = \frac{\mu}{2} \frac{a^{su}}{\sqrt{\sum_t a^{st} \rho^t}} \left(\frac{1}{L^u} - g_c \rho^u \right)$$

3. Travaux numériques

Simulation sur un agrégat « test » en acier 316L

Agrégat réalisé :

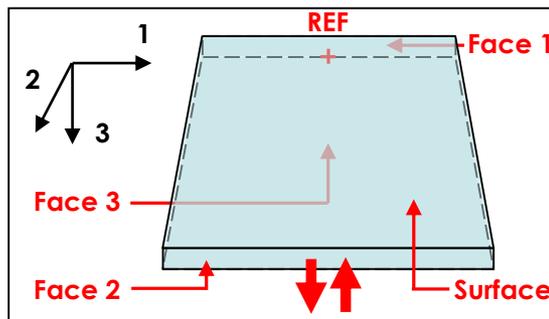


- Une seule couche EBSD ($100 \times 100 \mu\text{m}^2$)
- Éléments carrés ($2 \times 2 \times 2 \mu\text{m}^3$)
- Une couche empilée quatre fois
- 10 000 éléments

Simulation :

10 cycles, $\Delta\varepsilon_{22}/2 = 1\%$, vitesse de déformation $\varepsilon'_{22} = 5 \times 10^{-3} /\text{s}$ (0,125 Hz)

Conditions limites :

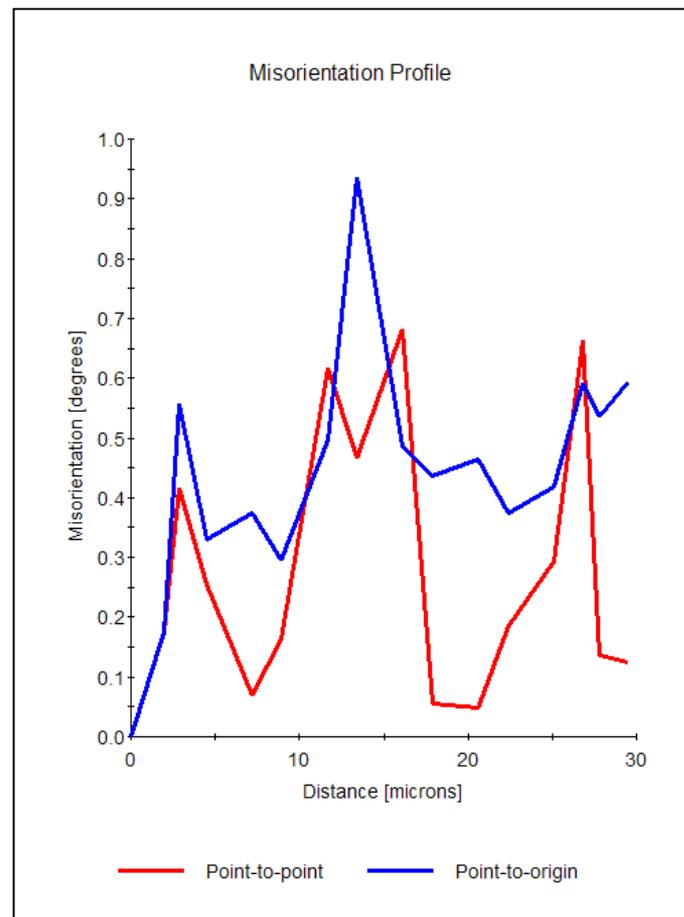
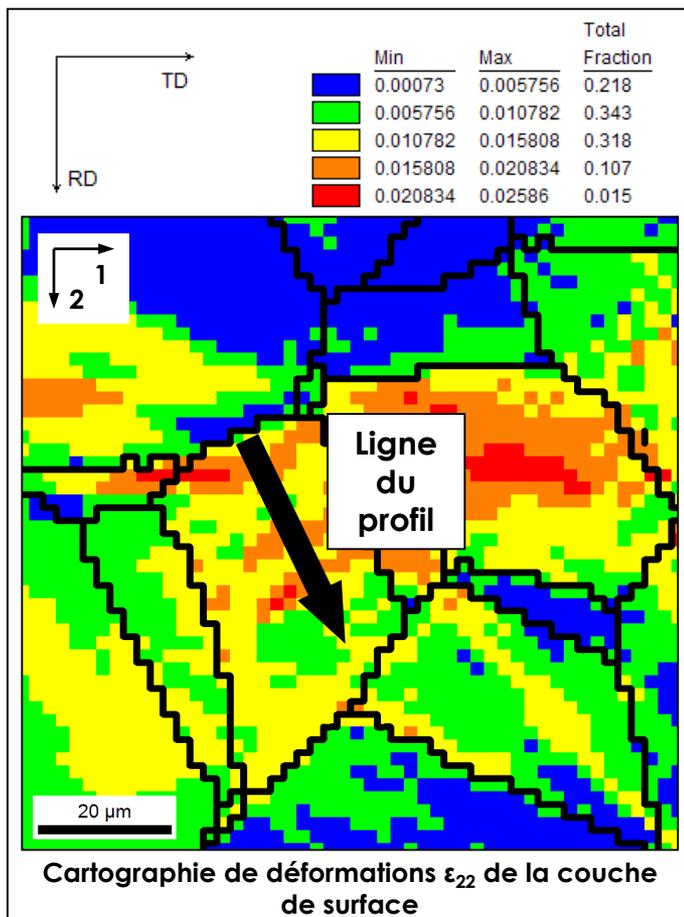
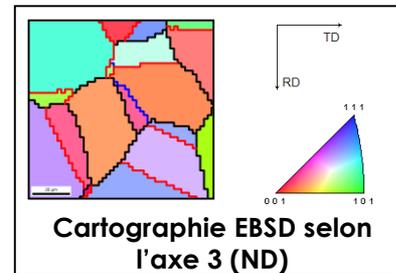


- Face 1 $U_2 = 0$
- Face 2 $U_2 = \text{déplacement imposé}$
- Face 3 $U_3 = 0$
- REF $U_1 = U_2 = U_3 = 0$
- Autres faces libres

3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur l'agrégat « test » en acier 316L (suite)

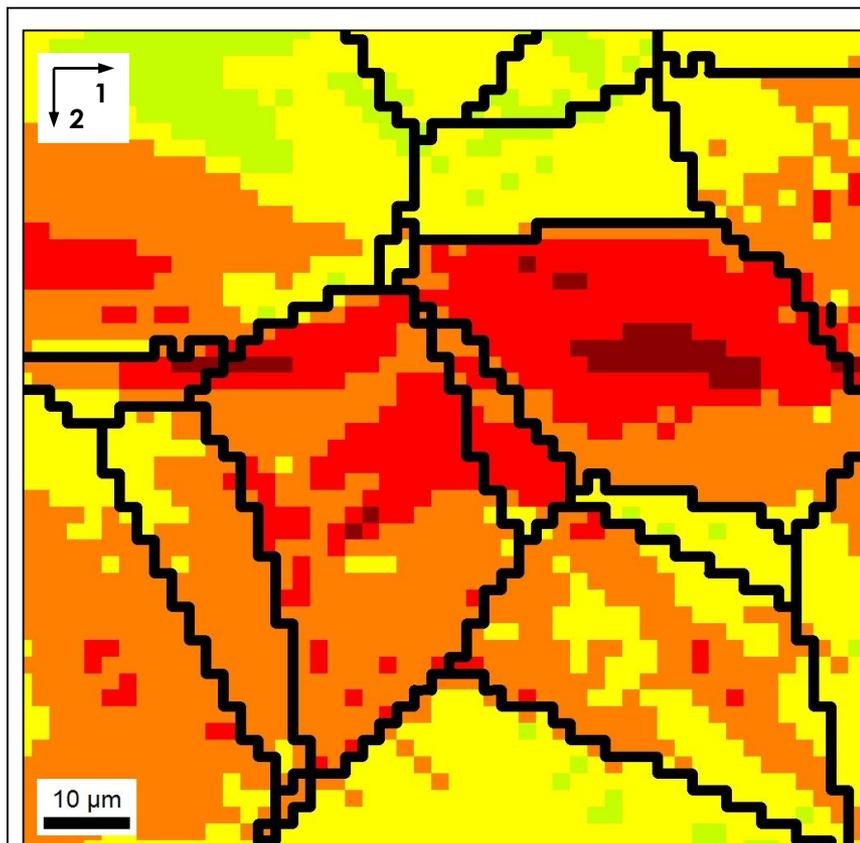
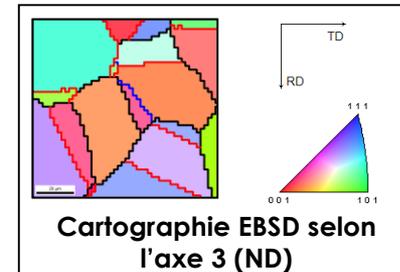
Cartographie de déformations ϵ_{22} et désorientations dans un grain après 10 cycles :



3. Travaux numériques

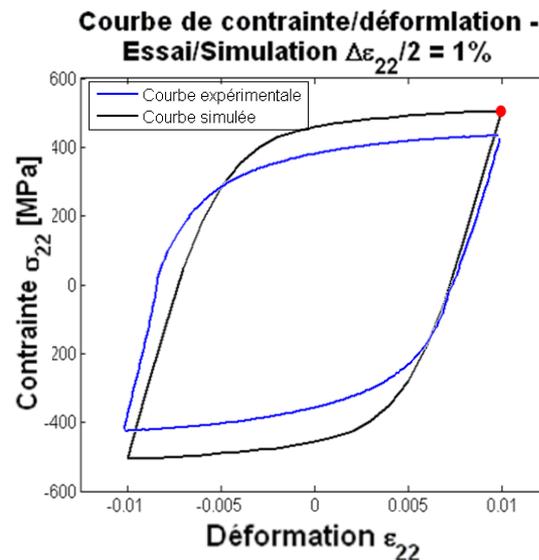
Résultats de la simulation sur l'agrégat « test » en acier 316L (suite)

Évolution de la déformation ϵ_{22} au cours du dernier cycle :



Cartographie de la déformation ϵ_{22} de la couche de surface

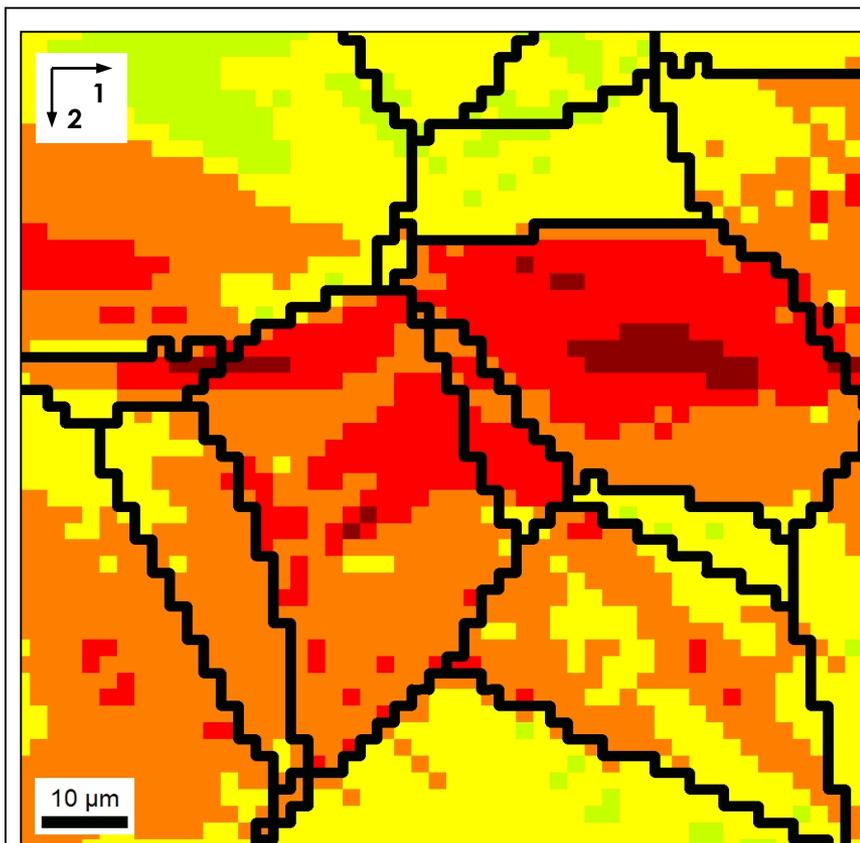
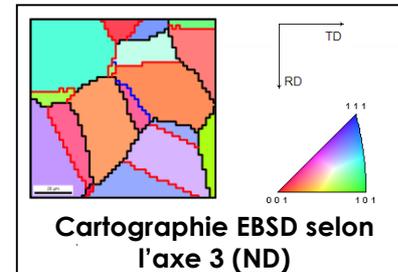
	Min	Max	Total Fraction
Dark Blue	-0.03743	-0.0277	0.000
Blue	-0.0203	-0.0145	0.000
Cyan	-0.0145	-0.0087	0.000
Green	-0.0087	-0.0029	0.000
Light Green	-0.0029	0.0029	0.058
Yellow	0.0029	0.0087	0.352
Orange	0.0087	0.0145	0.418
Red	0.0145	0.0203	0.154
Dark Red	0.0203	0.0261	0.016



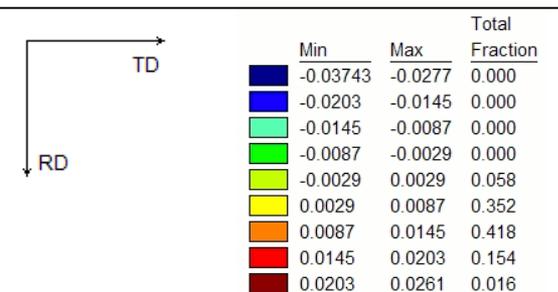
3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur l'agrégat « test » en acier 316L (suite)

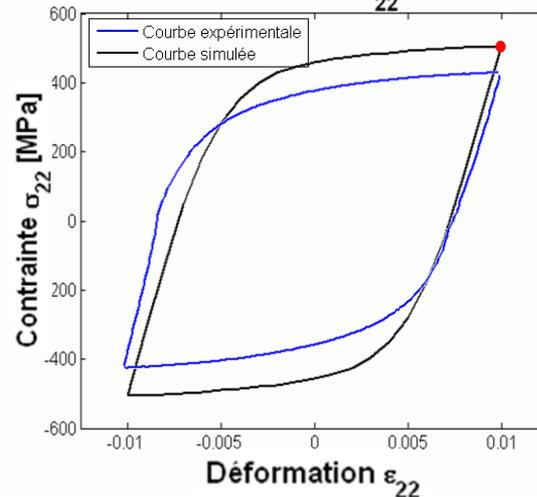
Évolution de la déformation ϵ_{22} au cours du dernier cycle :



Cartographie de la déformation ϵ_{22} de la couche de surface



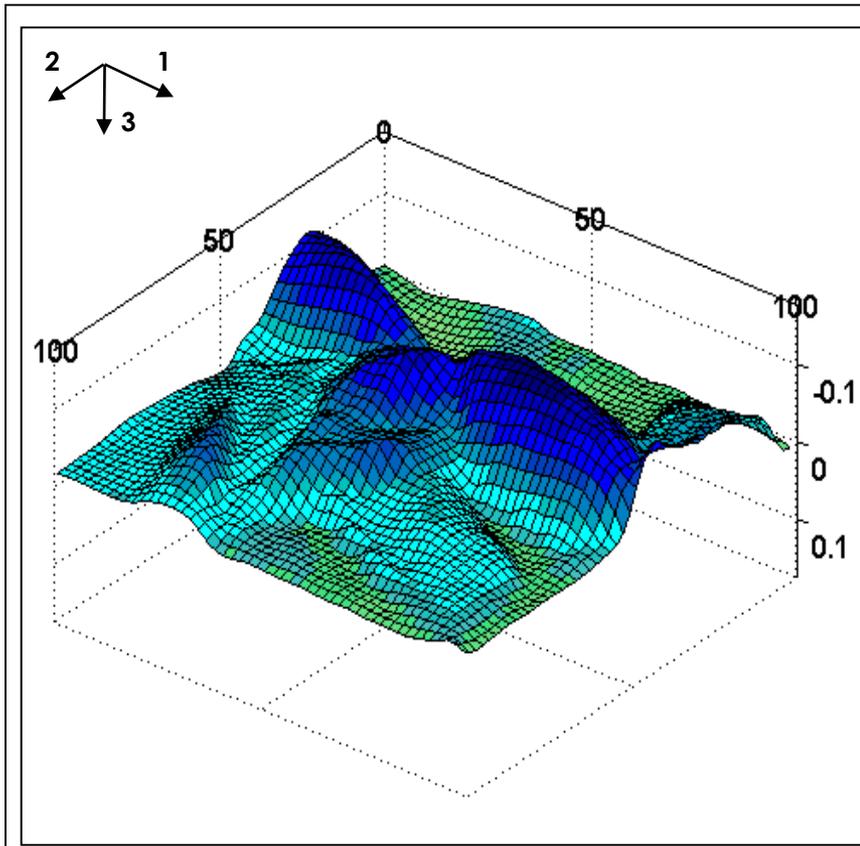
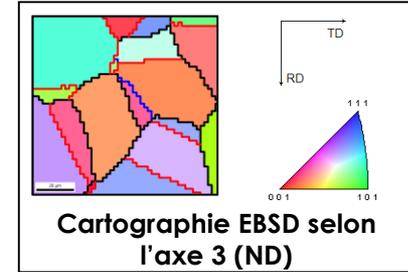
Courbe de contrainte/déformation - Essai/Simulation $\Delta\epsilon_{22}/2 = 1\%$



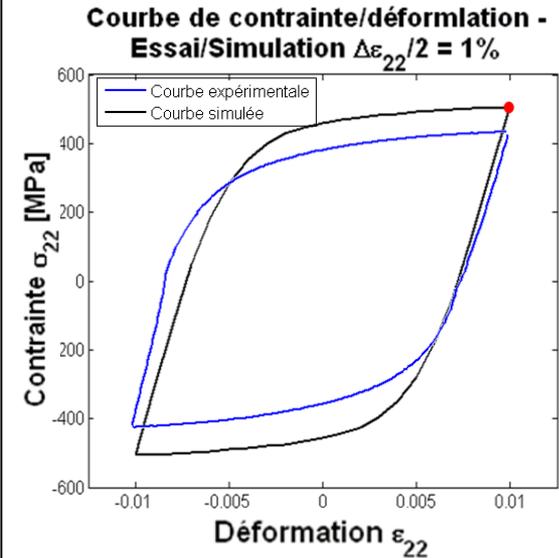
3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur l'agrégat « test » en acier 316L (suite)

Évolution du relief au cours du dernier cycle :



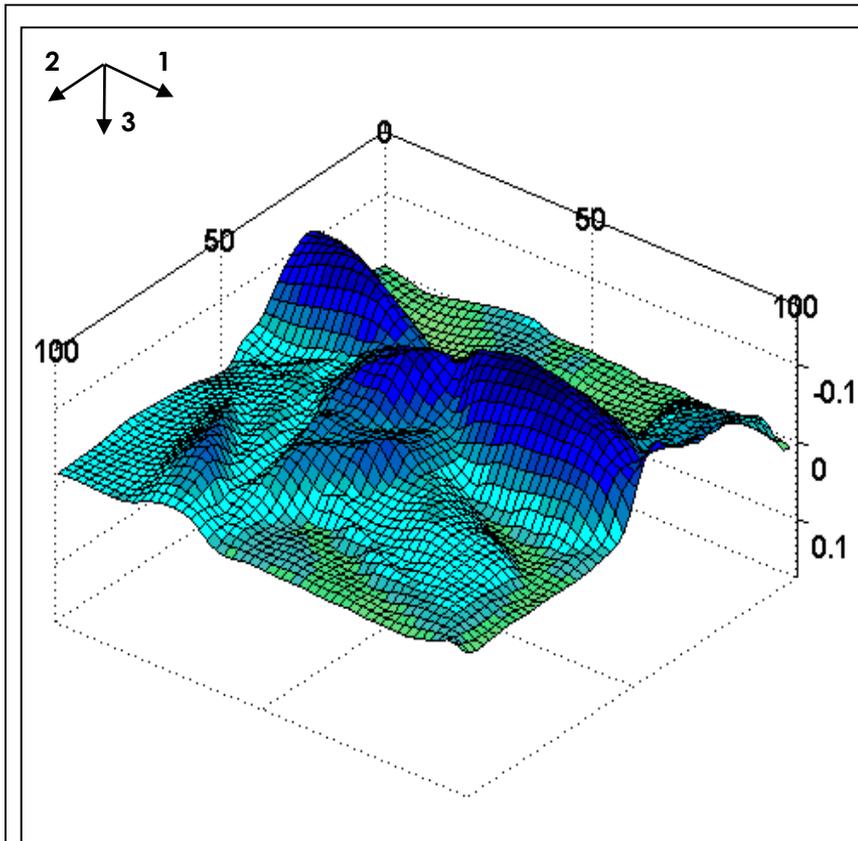
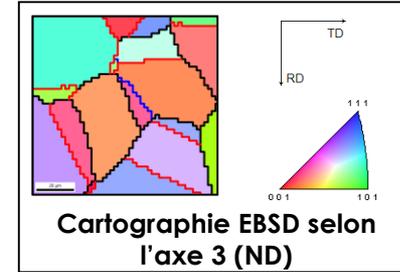
Relief de la couche de surface



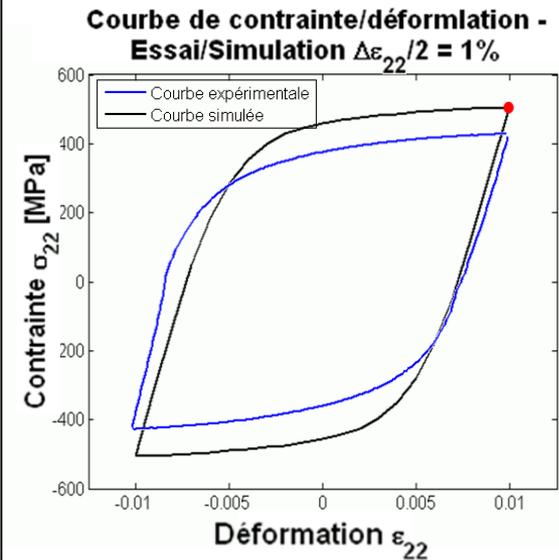
3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur l'agrégat « test » en acier 316L (suite)

Évolution du relief au cours du dernier cycle :



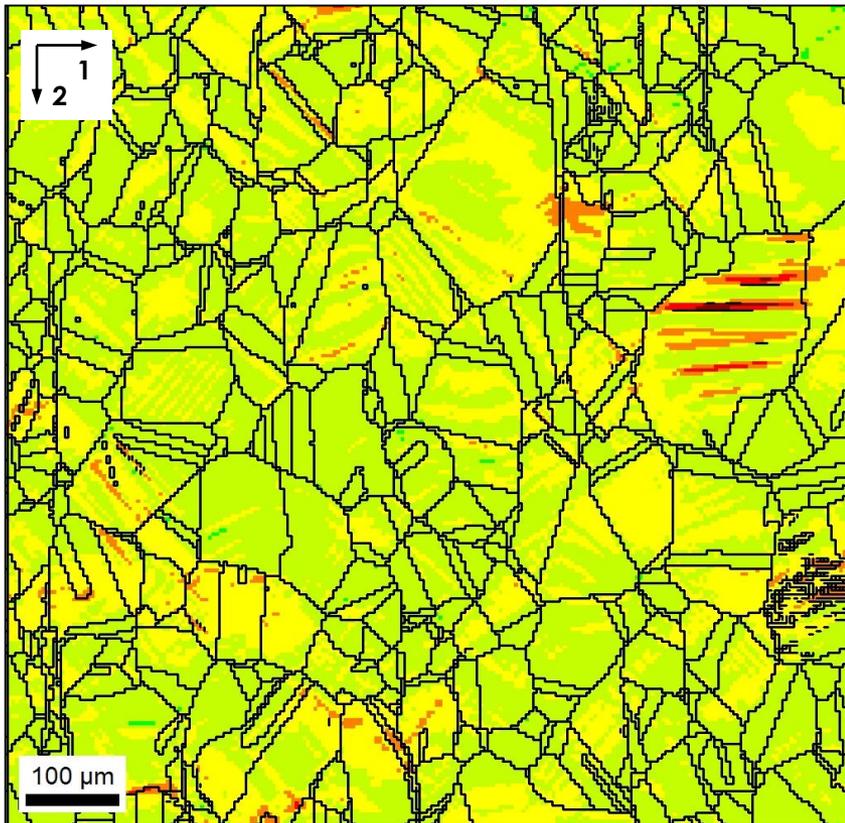
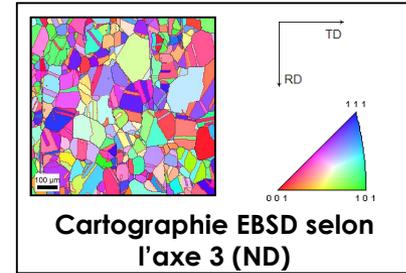
Relief de la couche de surface



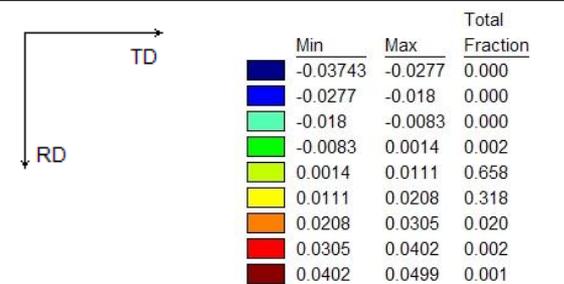
3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier 316L EDF-CEA - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments

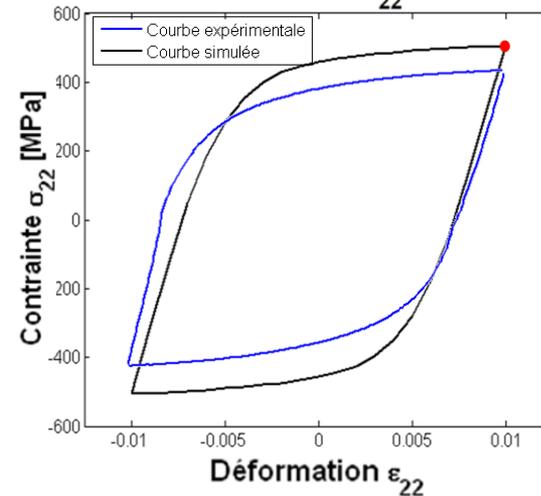
Évolution de la déformation ϵ_{22} au cours du dernier cycle :



Cartographie de la déformation ϵ_{22} de la couche de surface



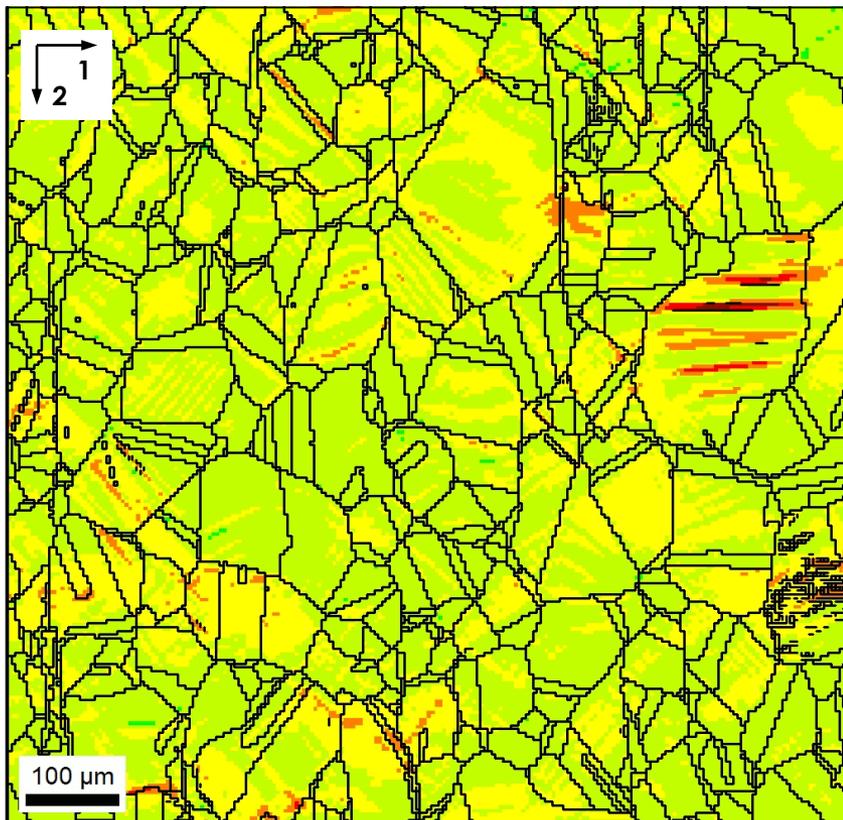
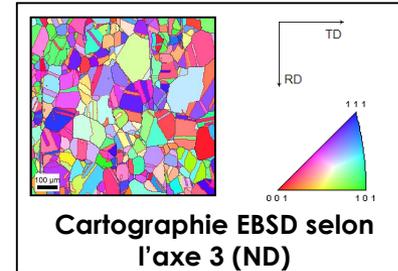
Courbe de contrainte/déformation - Essai/Simulation $\Delta\epsilon_{22}/2 = 1\%$



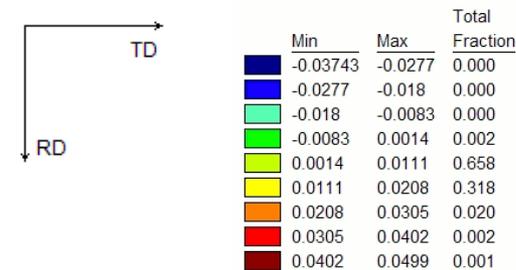
3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier 316L EDF-CEA - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments

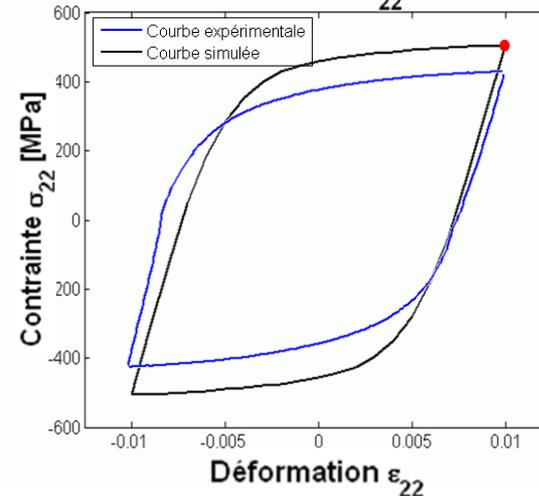
Évolution de la déformation ϵ_{22} au cours du dernier cycle :



Cartographie de la déformation ϵ_{22} de la couche de surface

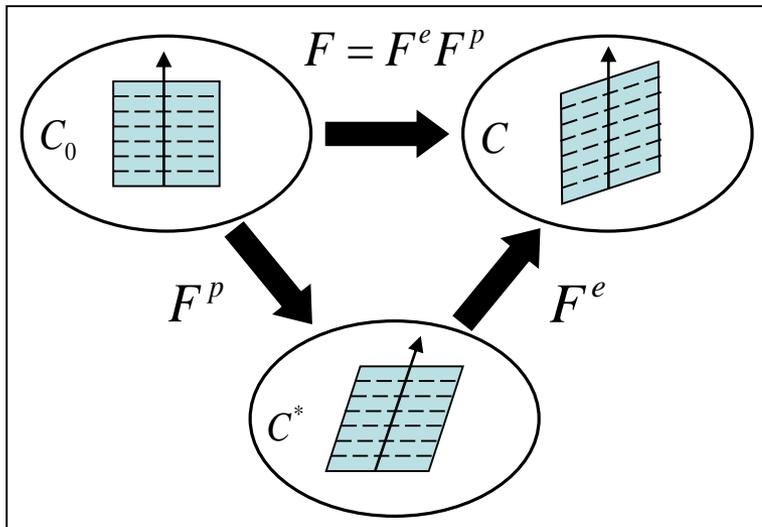


Courbe de contrainte/déformation - Essai/Simulation $\Delta\epsilon_{22}/2 = 1\%$



3. Travaux numériques

- **Modèle CristalECP intégrant l'approche non locale**



Grandes transformations :

$$d\vec{x} = F^e F^p d\vec{x}_0 = F^e d\vec{x}^*$$

$$d\dot{\vec{x}}^* = \dot{F}^p d\vec{x}_0 = \dot{F}^p F^{p-1} d\vec{x}^*$$

$$\dot{F}^p F^{p-1} = L^{p*} = \sum_s \dot{\gamma}^s \vec{m}^{s*} \otimes \vec{n}^{s*}$$

Vecteur de Burgers :

$$C \rightarrow C^* : b^e = \oint_{\partial s} F^{e-1} dx = \iint_s (\text{rot} F^{e-1})^T \vec{n} ds = \iint_s J^e F^{e-1} (\text{rot} F^{e-1})^T \vec{n}^* ds^*$$

$$G^e = J^e F^{e-1} \text{rot} F^{e-1}$$

Tenseur des dislocations géométriquement nécessaires

$$C_0 \rightarrow C^* : b^p = \oint_{\partial s} F^p dx_0 = \iint_s (\text{Rot} F^p)^T \vec{n}_o ds_0 = \iint_s \frac{1}{J^p} F^p (\text{Rot} F^p)^T \vec{n}^* ds^*$$

$$G^p = \frac{1}{J^p} F^p \text{Rot} F^p$$

Tenseur des dislocations géométriquement nécessaires

3. Travaux numériques

Implémentation dans le modèle :

$$b^e = \oint_{\partial s} F^{e-1} dx = \iint_s \left(\text{rot} F^{e-1} \right)^T \vec{n} ds$$

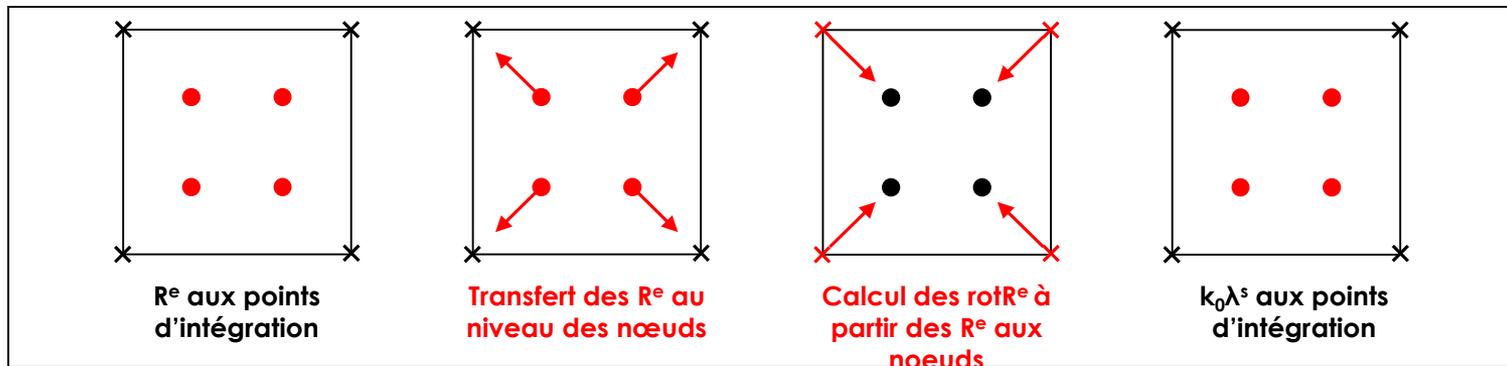
$$\Lambda = \left(\text{rot} F^{e-1} \right)^T \approx \left(\text{rot} R^{e-1} \right)^T$$

$$\lambda^s = \sqrt{(\Lambda \vec{n}^s) : (\Lambda \vec{n}^s)}$$

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left(k_0 \lambda^s + \frac{1}{L^s} - g_c \rho^s \right)$$

Calcul du second gradient :

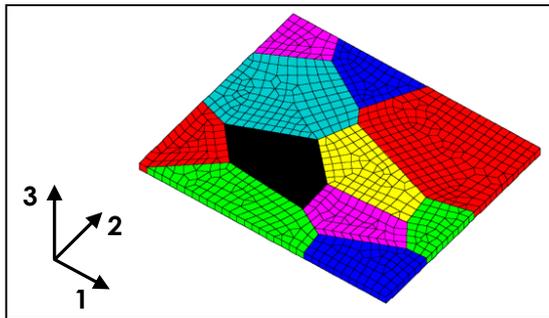
Calcul explicite effectué pour tous les éléments à la fin de chaque pas de temps pour le pas de temps suivant (Cast3m : PASAPAS-PERSO1)



3. Travaux numériques

Premier test Cast3m™ - simulation

Agrégat « test » en acier IF :

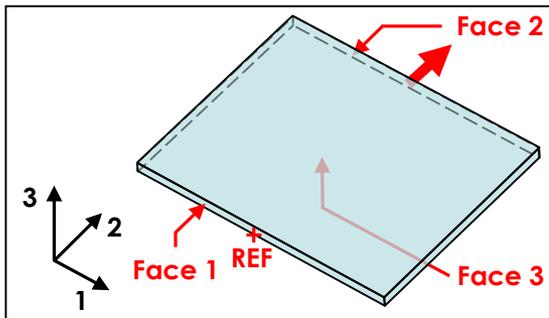


- Morphologie des grains non réelle
- Orientations cristallines non réelles
- 11 grains
- Taille de l'agrégat $(100 \times H) \times (100 \times H) \mu\text{m}^2$
- Paramètre « non local » $k_0 = 500$

Simulation :

Essais de traction $\epsilon_{22} = 2\%$, vitesse de déformation $\epsilon'_{22} = 5 \times 10^{-3} /\text{s}$

Conditions limites :

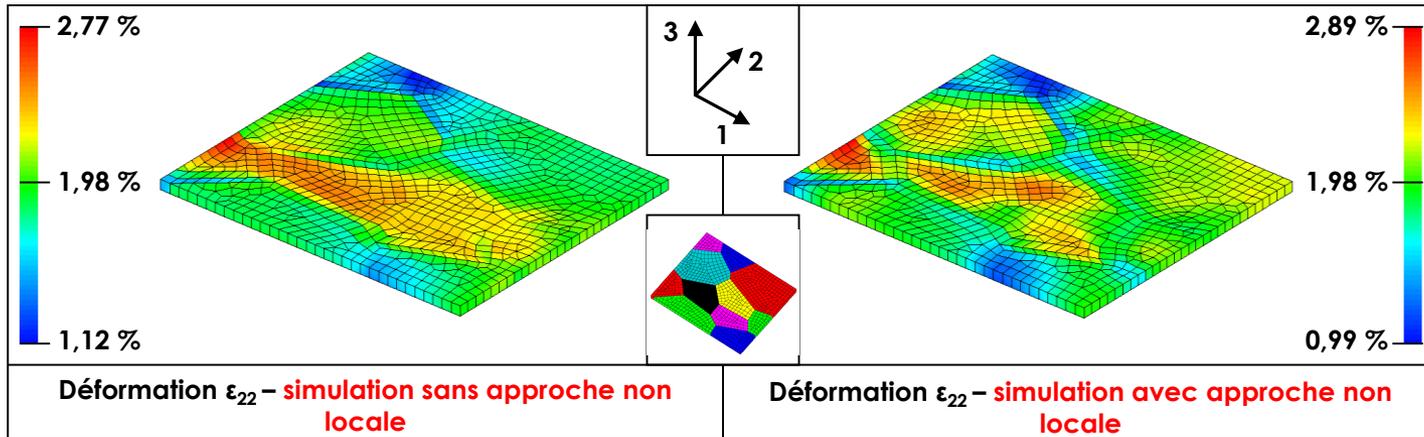


- Face 1 $U_2 = 0$
- Face 2 $U_2 = \text{déplacement imposé}$
- Face 3 $U_3 = 0$
- REF $U_1 = U_2 = U_3 = 0$
- Autres faces libres

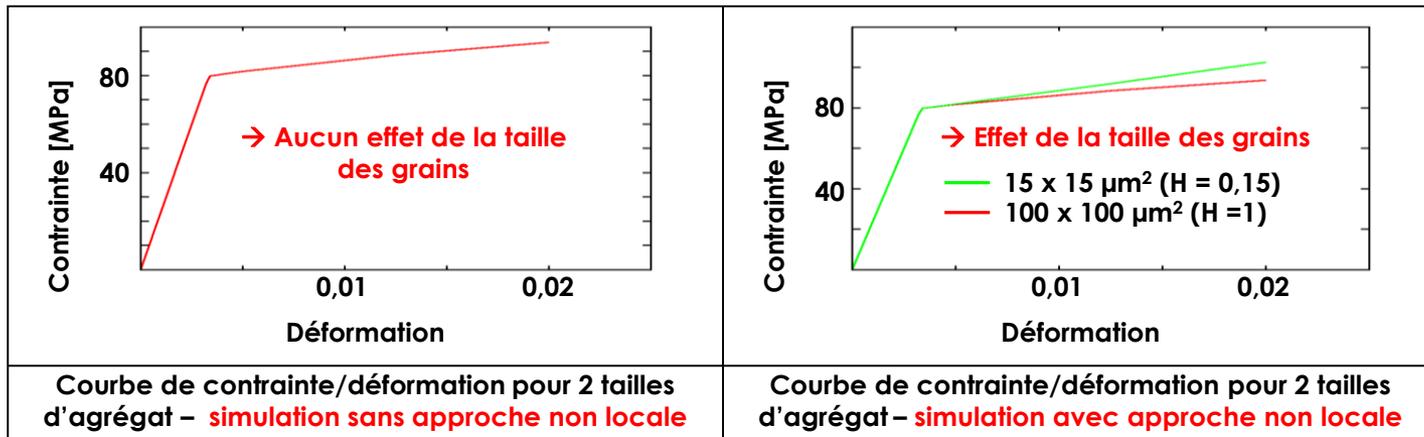
3. Travaux numériques

Premier test Cast3m™ - résultats

Comparaison CristalECP classique et CristalECP non local :



Influence de la taille de grain – Variation de $H = 1$ et $H = 0,15$:



4. Conclusion et perspectives

Construction d'agrégats :

- Développement d'un outil automatisant la génération des agrégats
- Travail en cours pour améliorer la génération d'agrégats (lissage de joints de grains)

→ **Recherche d'un moyen autre que le polissage manuel successif pour obtenir les cartographies nécessaires à la génération d'agrégats**

Simulation générale :

- Développement d'outils de post-traitement
- Parallélisation du modèle sur AbaqusTM (existe déjà sous Cast3mTM)

→ **Étude de la pertinence des conditions aux limites**

Simulation avec le modèle CristalECP intégrant une approche non locale :

- Les premiers tests sur Cast3mTM sont encourageants
- L'intégration de l'approche non locale sur AbaqusTM est en cours

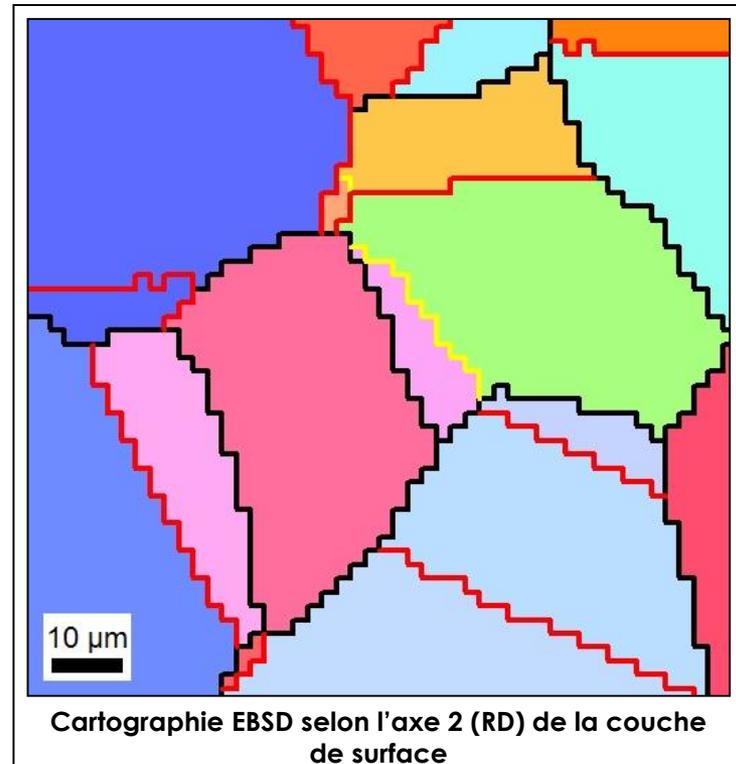
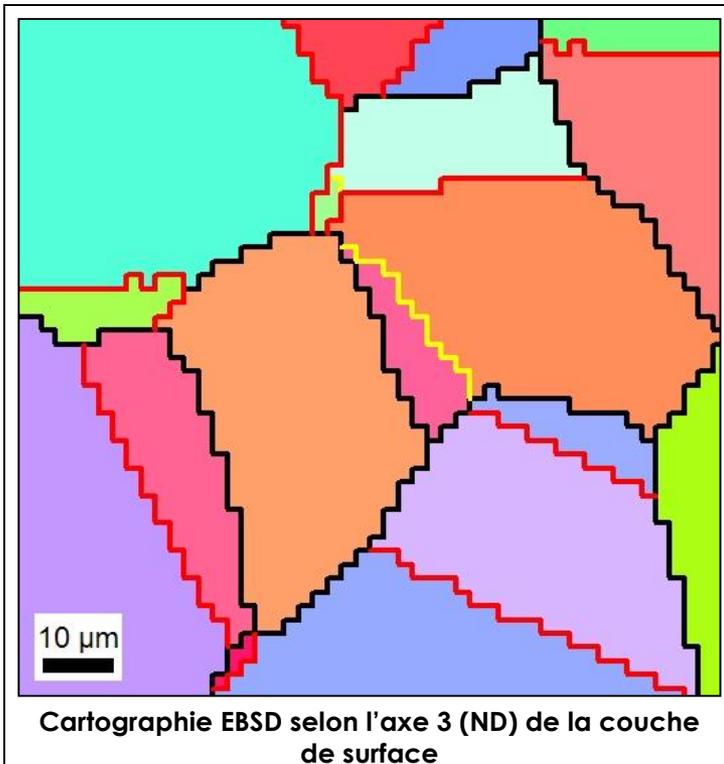
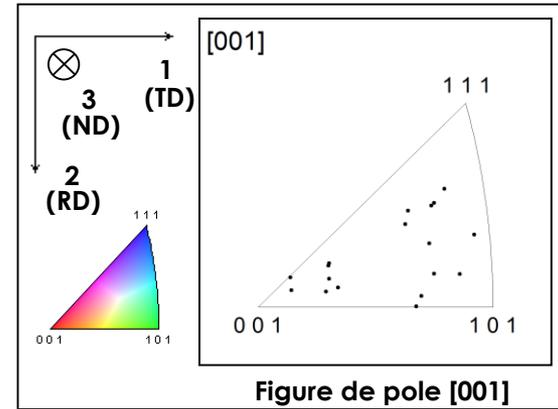
→ **Insertion de d'un écoulement cinématique**

**Merci pour votre
attention**

3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA

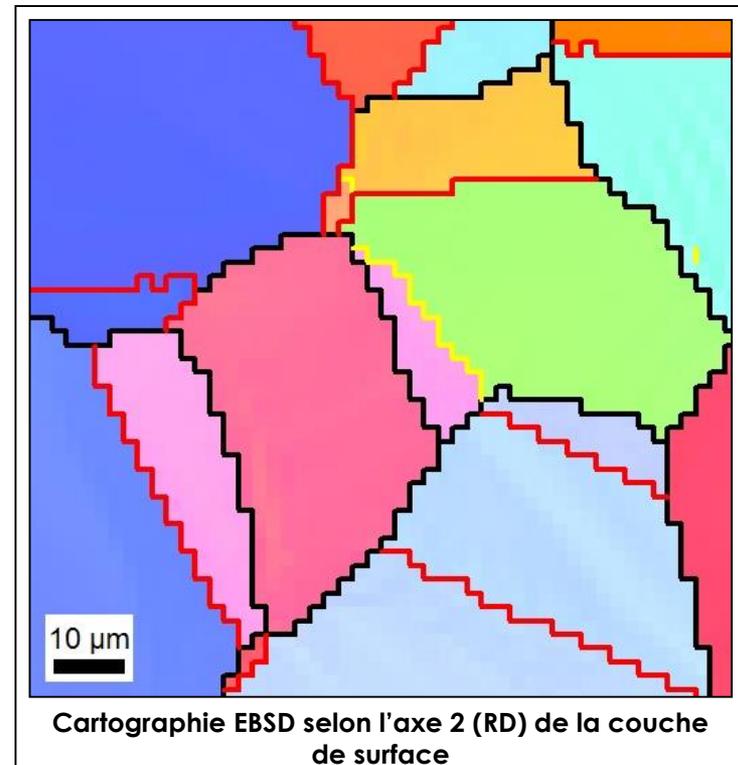
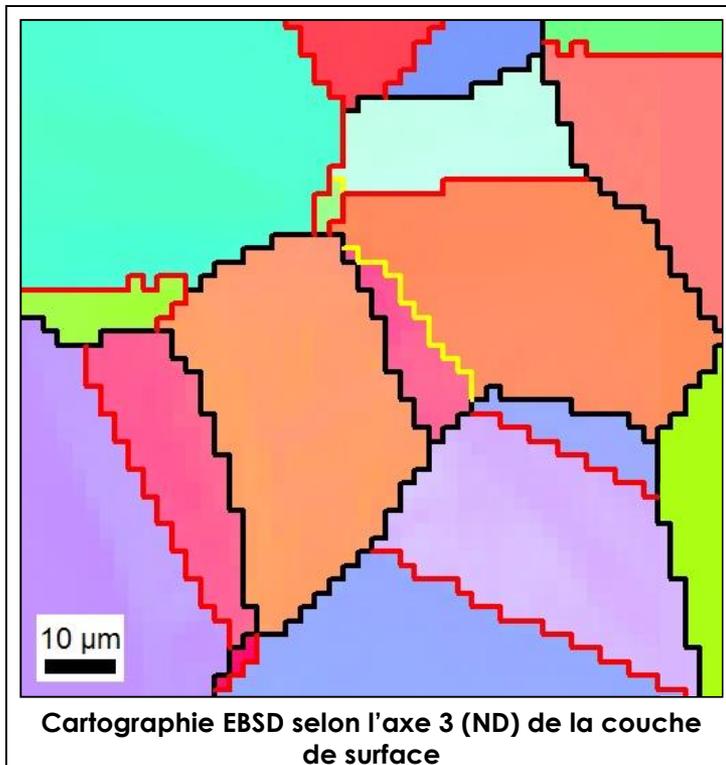
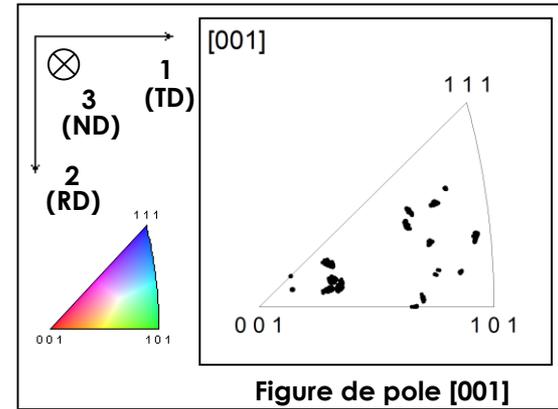
Cartographie EBSD avant déformation :



3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

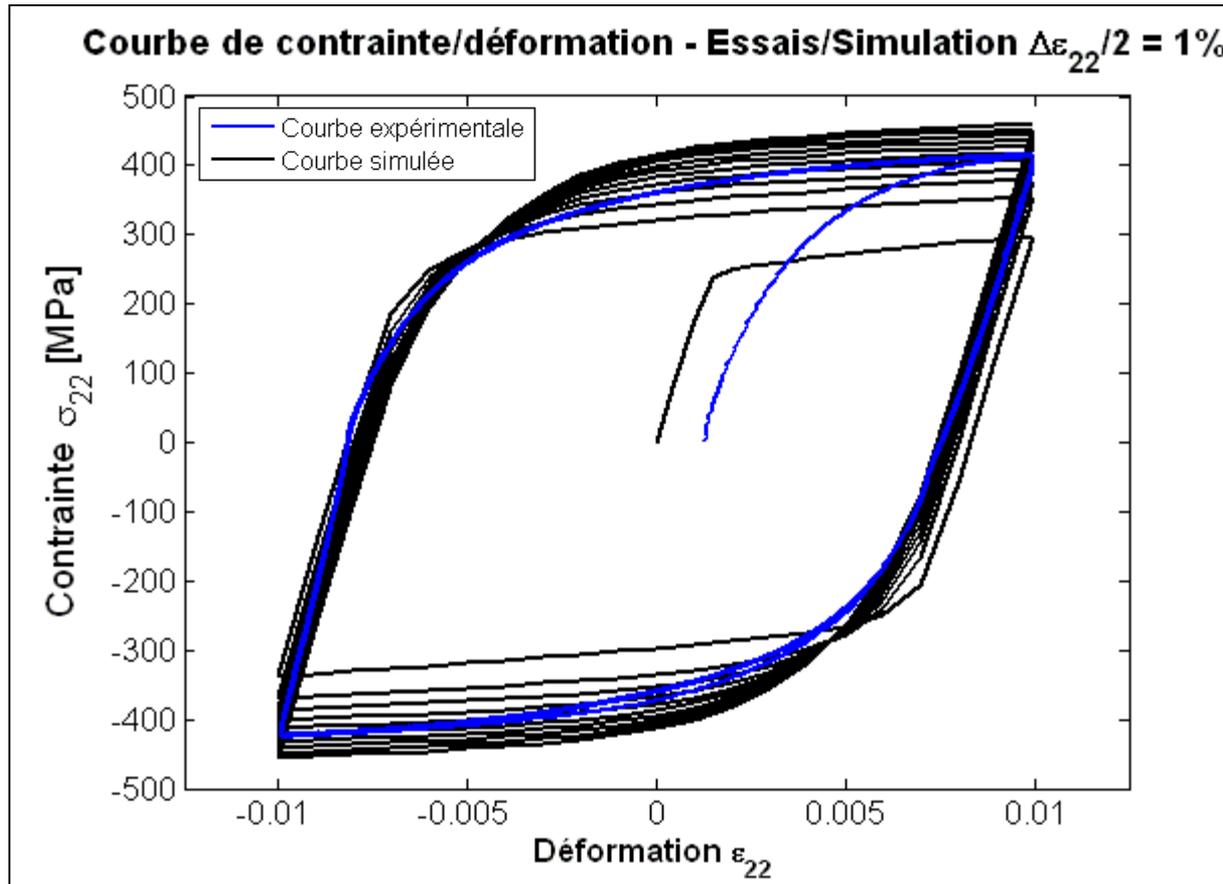
Cartographie EBSD après 10 cycles :



3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

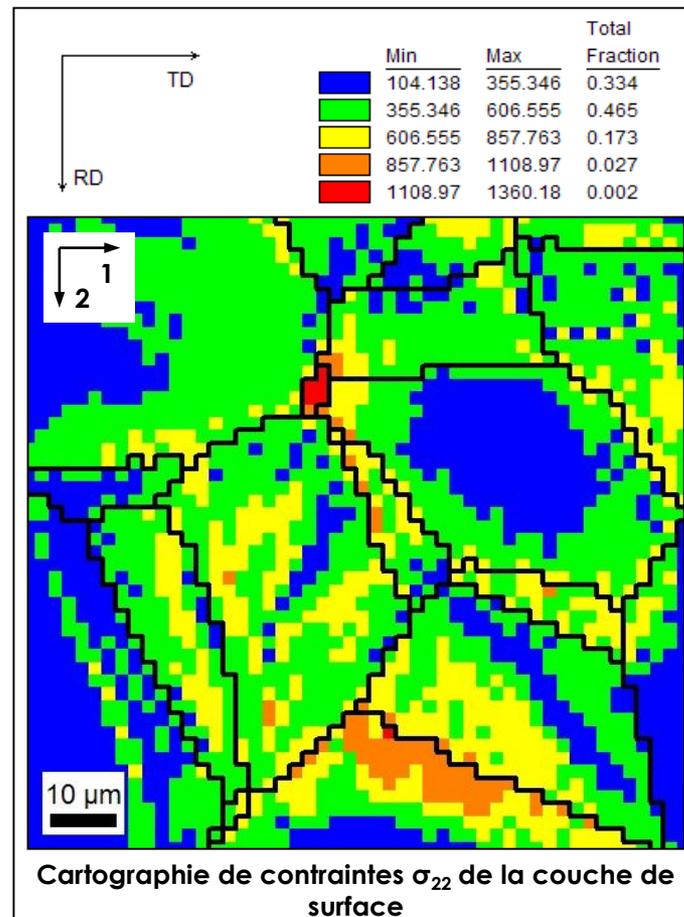
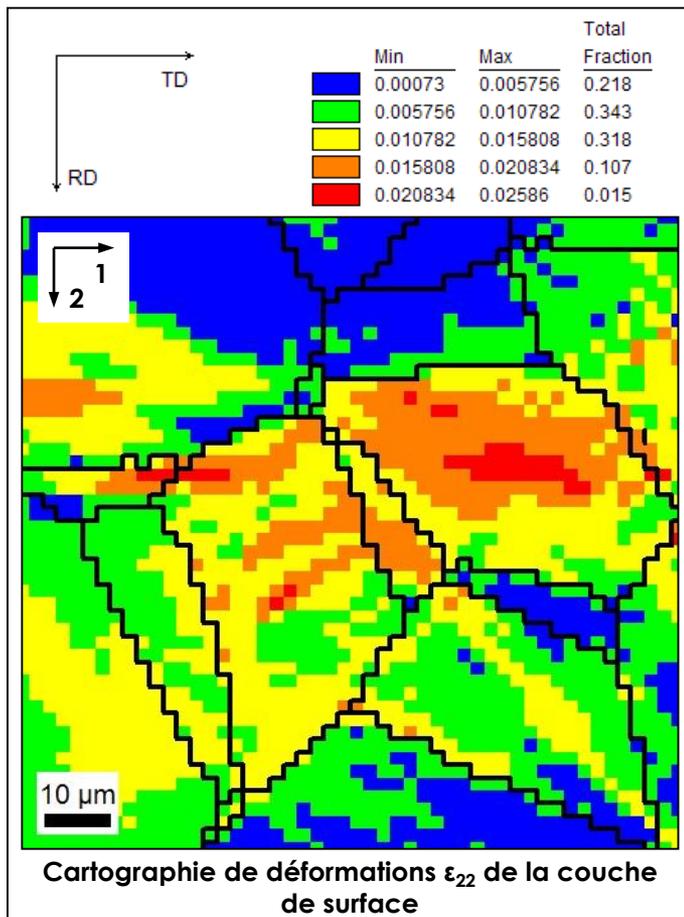
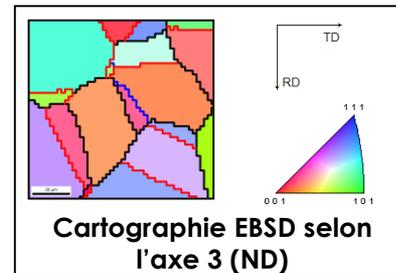
Courbe de contrainte/déformation expérimentale et simulée **après 10 cycles** :



3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

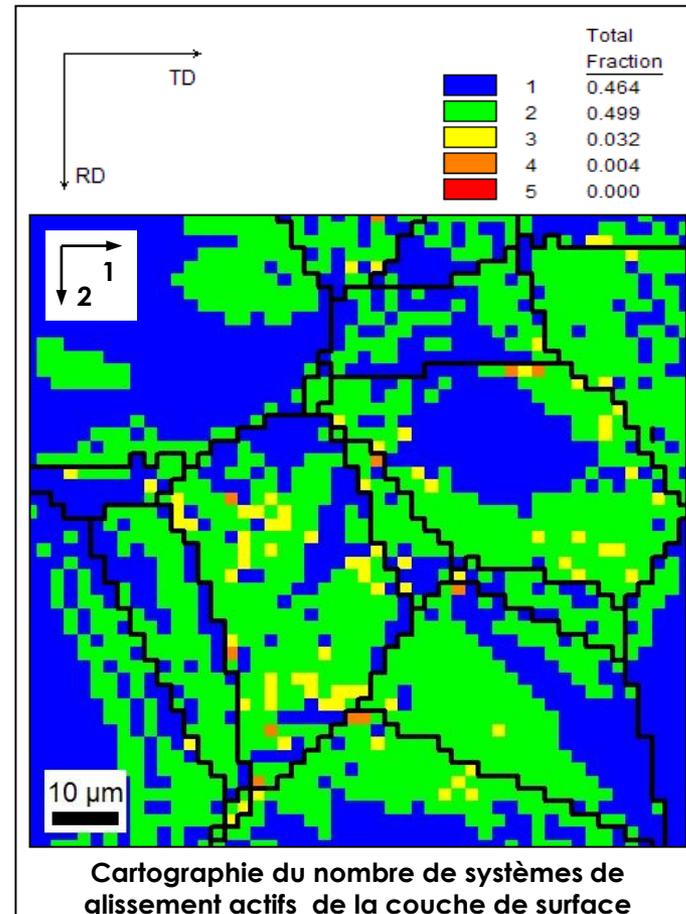
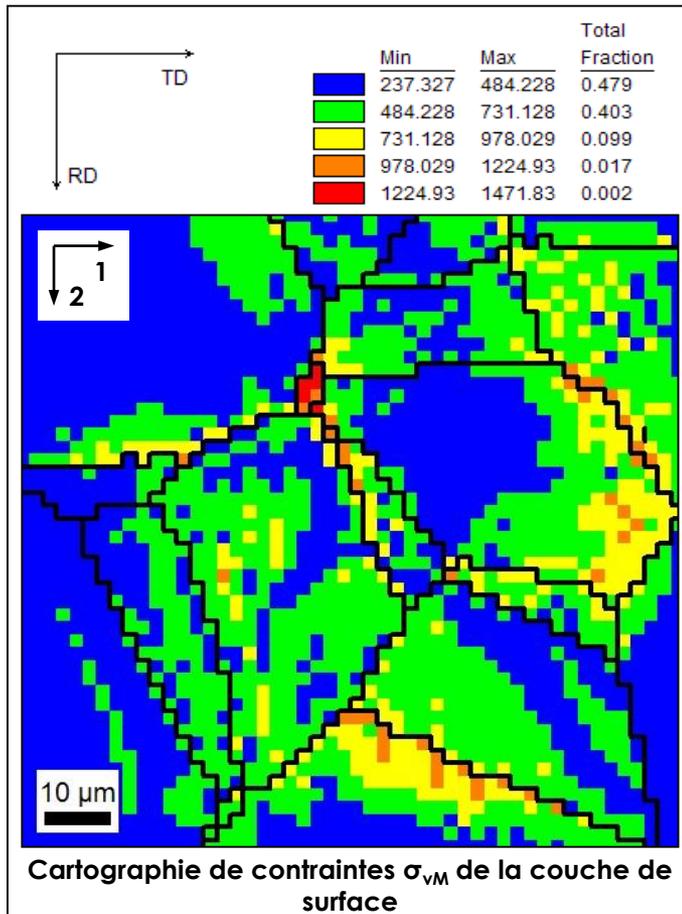
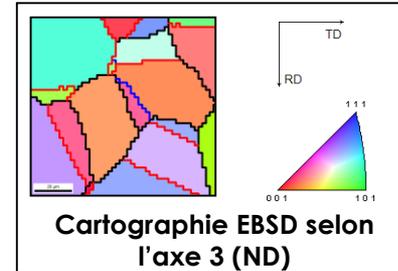
Cartographie de déformations ϵ_{22} et de contraintes σ_{22} après 10 cycles :



3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

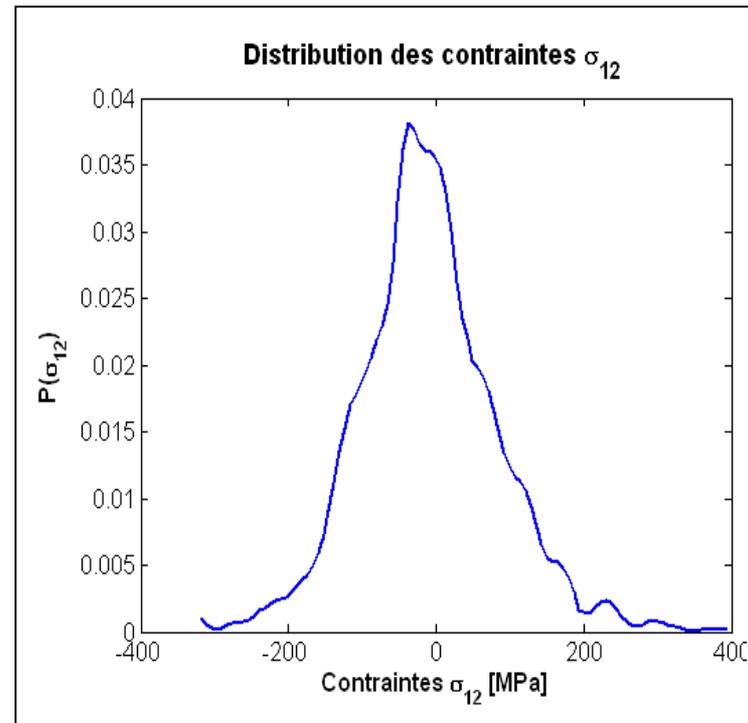
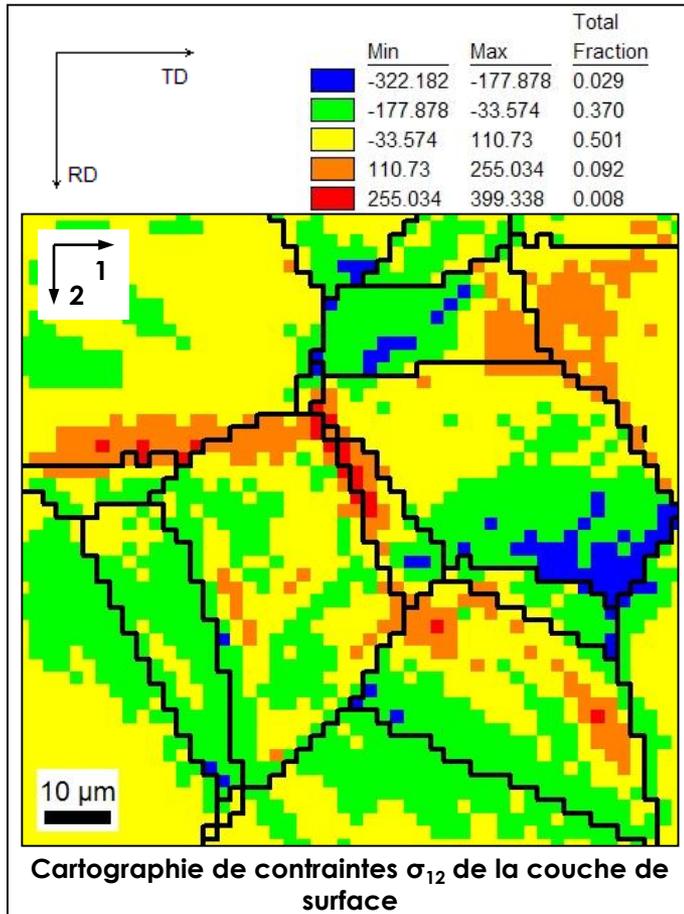
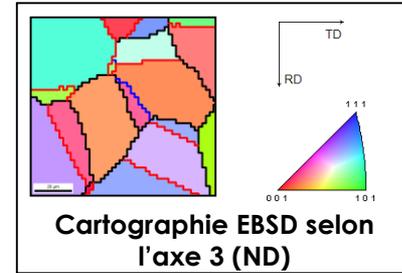
Cartographie de contraintes σ_{VM} et du nombre de systèmes de glissement actifs après 10 cycles :



3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

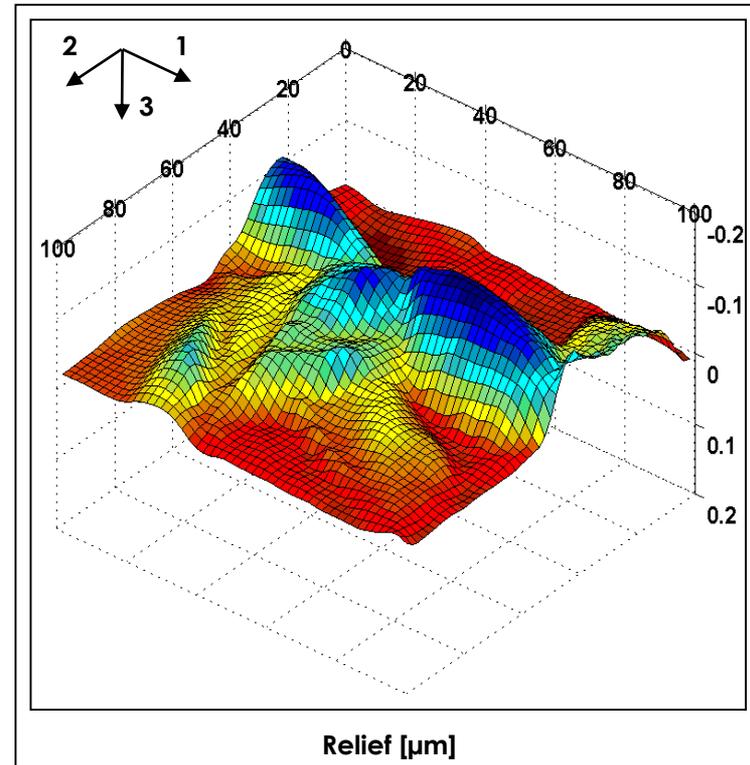
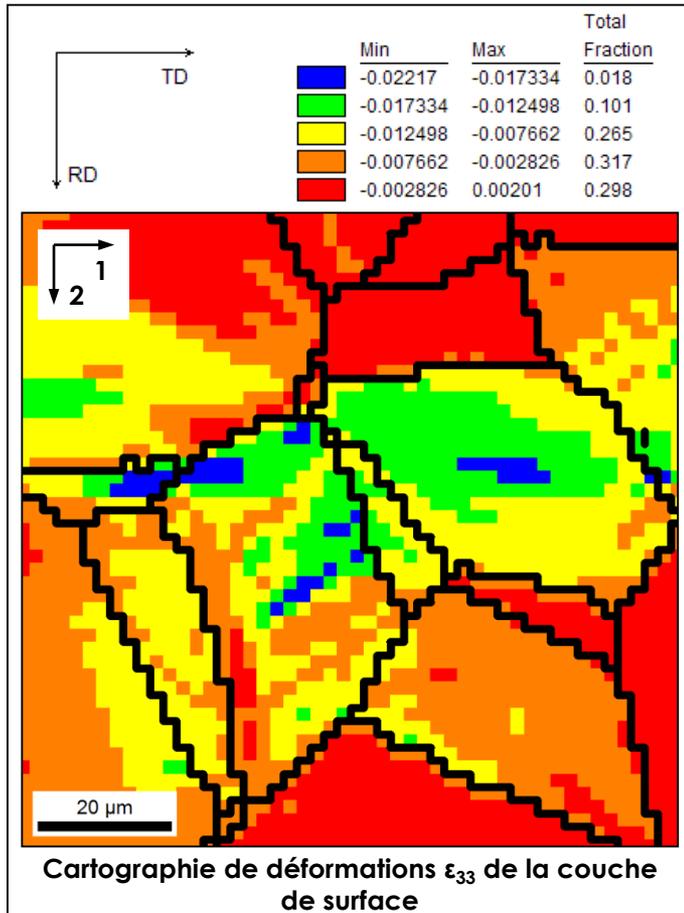
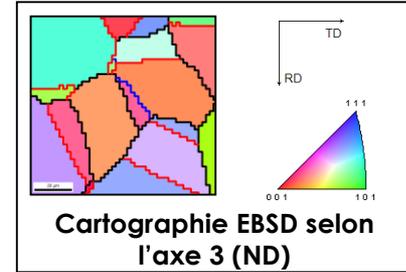
Cartographie et distribution des contraintes σ_{12} après 10 cycles :



3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

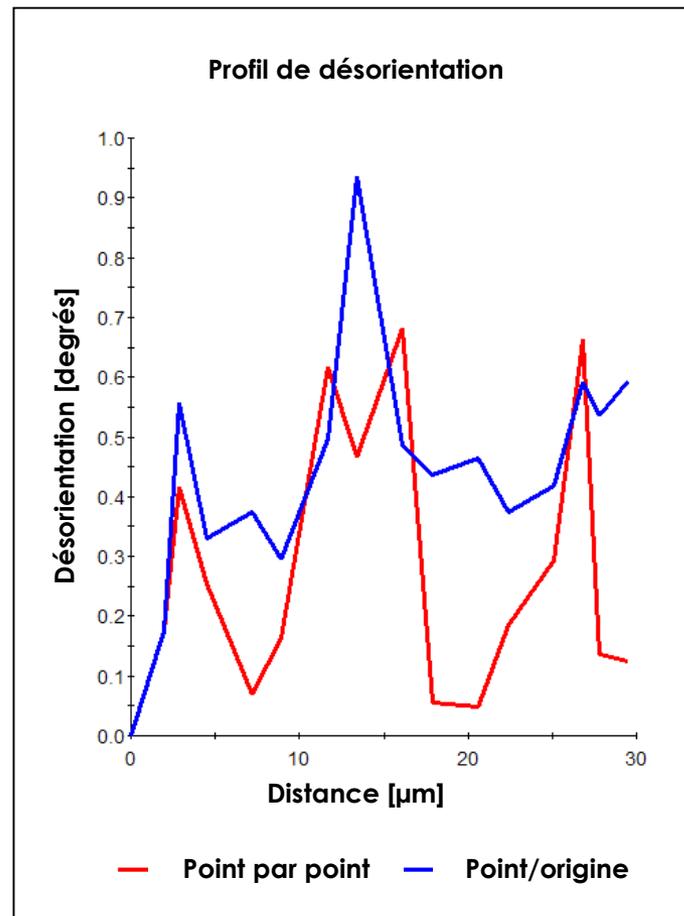
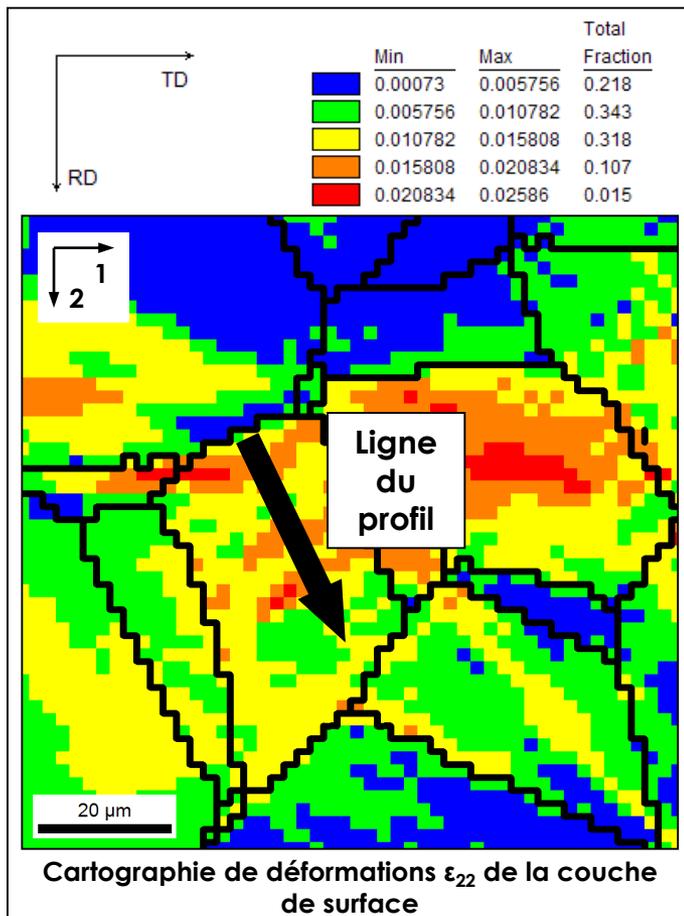
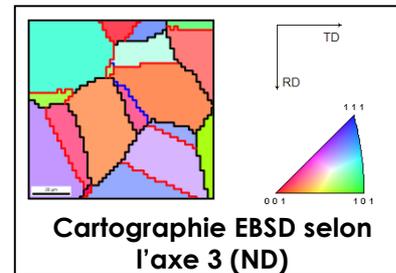
Cartographie de déformations ϵ_{33} et relief **après 10 cycles** :



3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

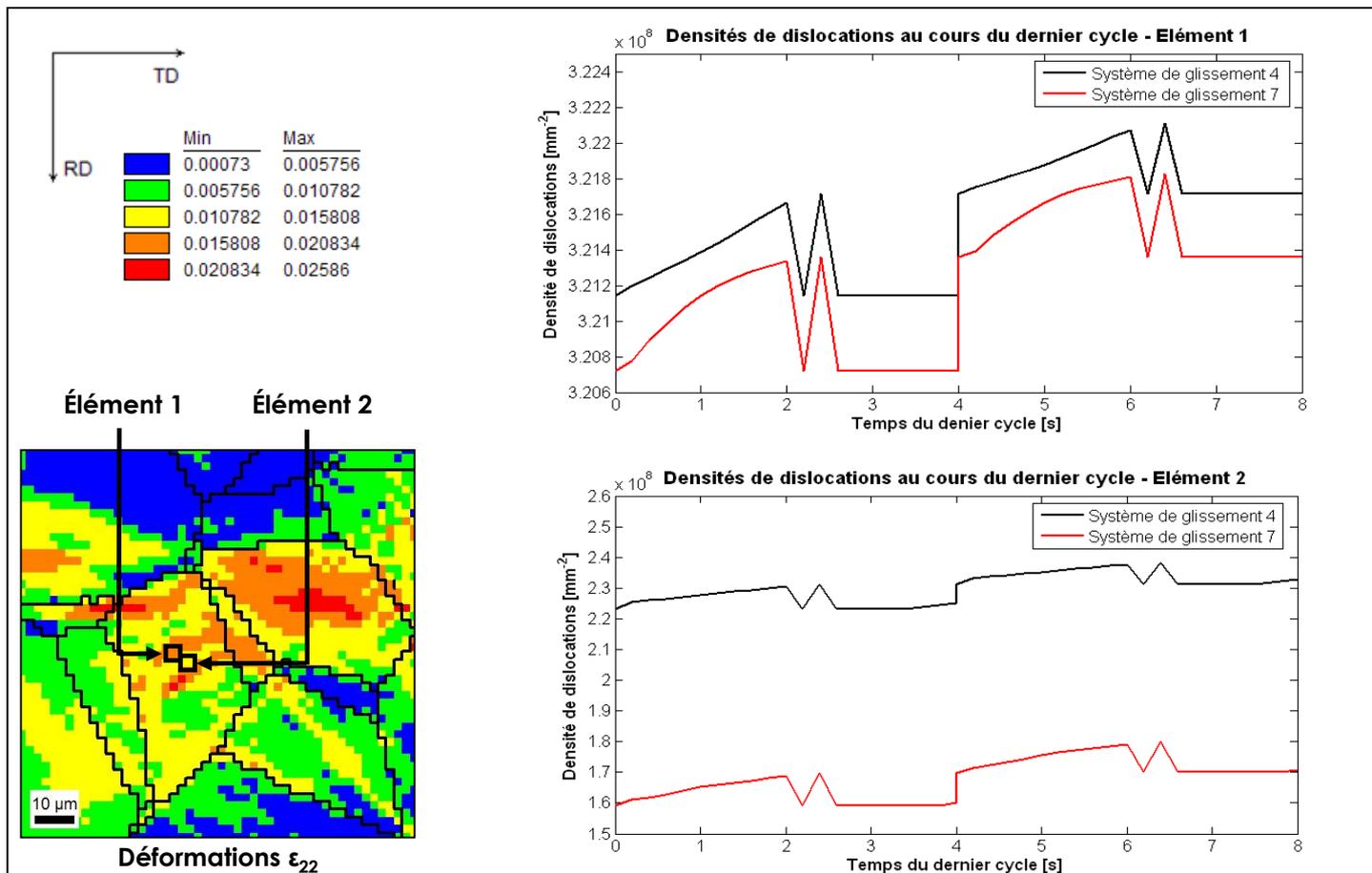
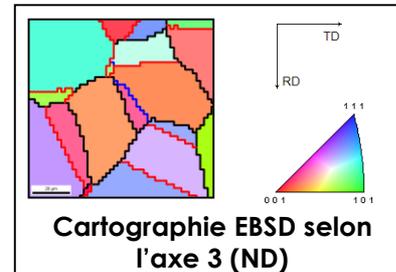
Cartographie de déformations ϵ_{22} et désorientations dans un grain après 10 cycles :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

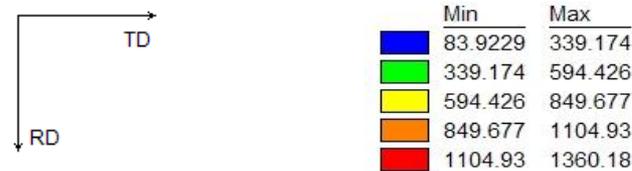
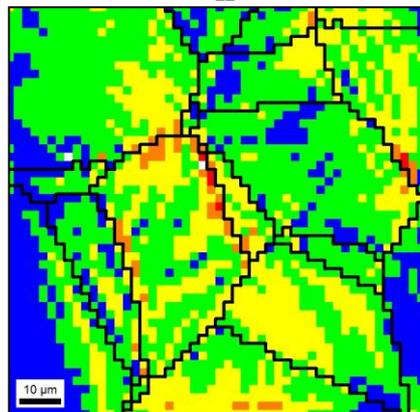
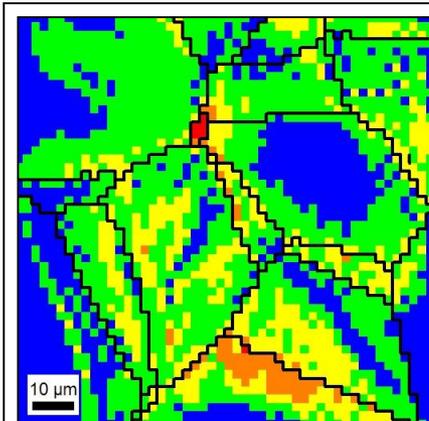
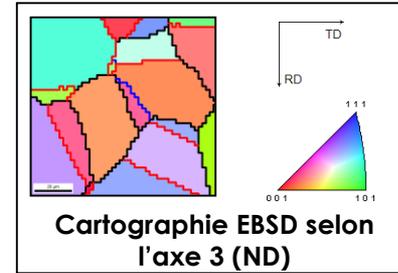
Évolution de la densité de dislocations au cours du dernier cycle pour deux éléments :



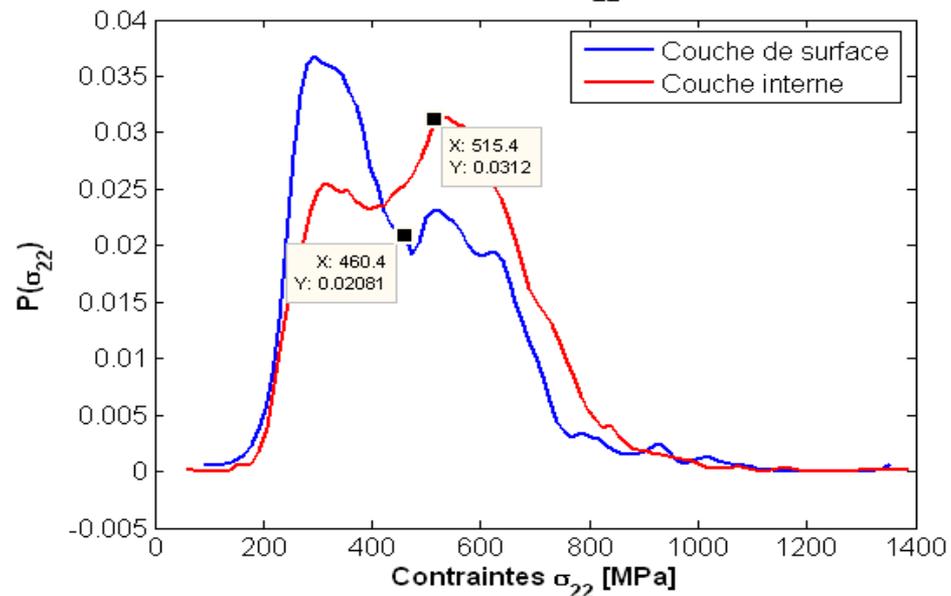
3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

Contraintes σ_{22} dans la couche de surface (couche 1) et la couche interne (couche 3) :



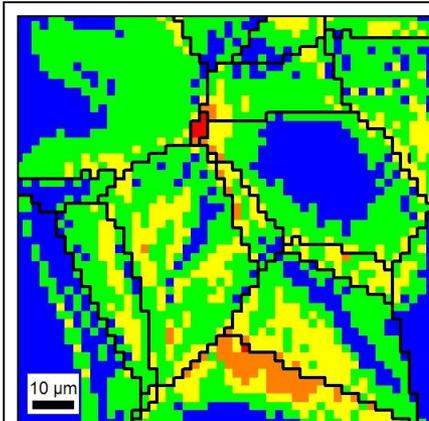
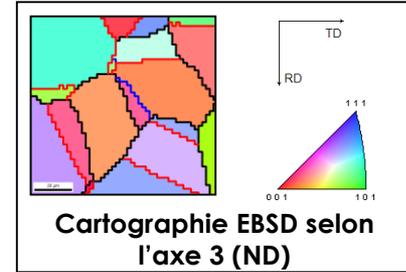
Distribution des contraintes σ_{22} dans les 2 couches



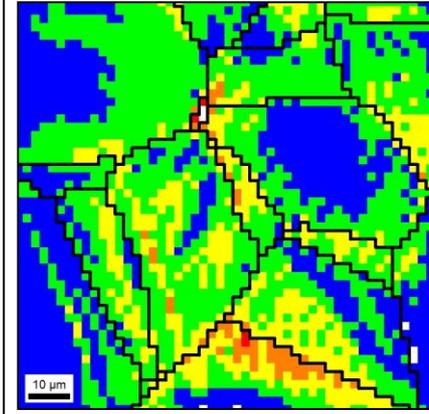
3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

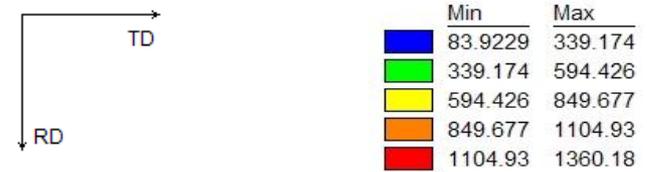
Contraintes σ_{22} pour 2 vitesses de déformation – $\dot{\epsilon}'_{22} = 5 \times 10^{-3} /s$ et $\dot{\epsilon}'_{22} = 10^{-3} /s$:



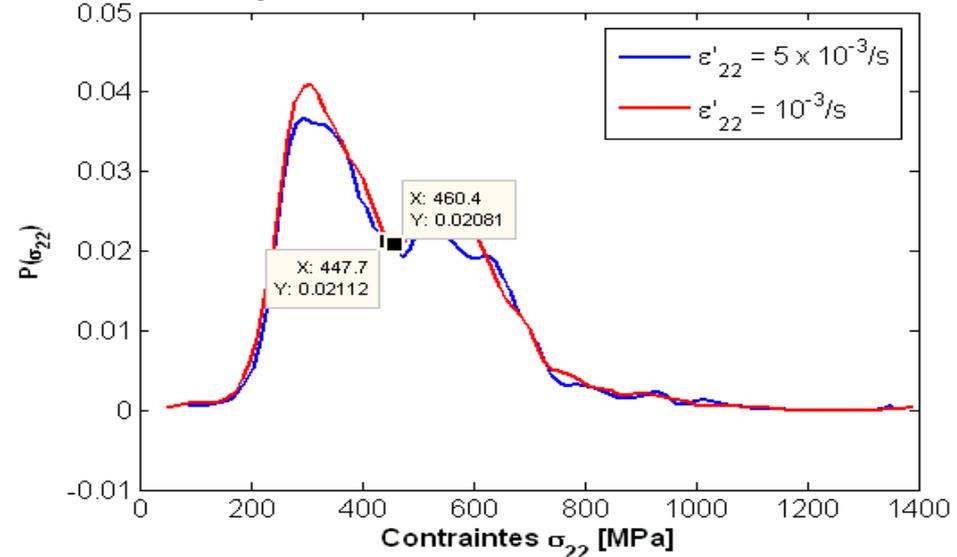
Contraintes $\sigma_{22} - \dot{\epsilon}'_{22} = 5 \times 10^{-3}/s$



Contraintes $\sigma_{22} - \dot{\epsilon}'_{22} = 10^{-3}/s$



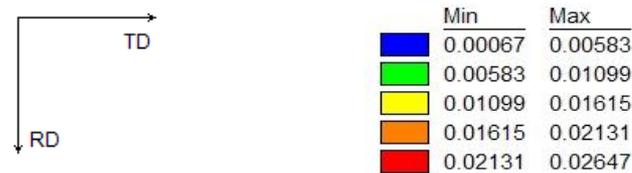
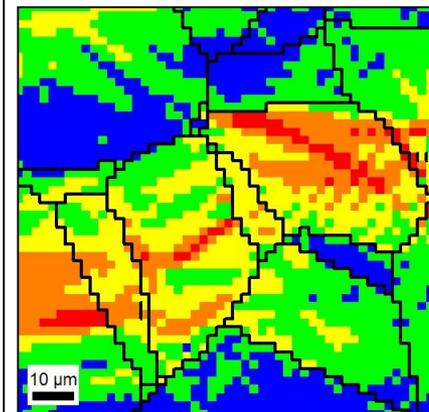
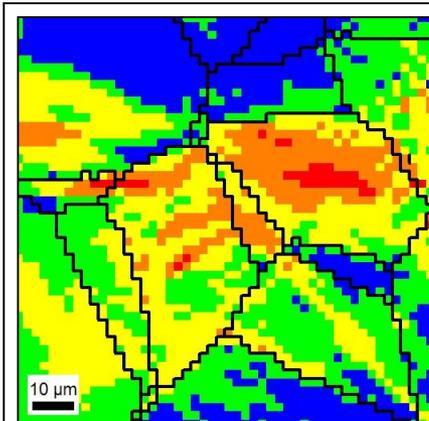
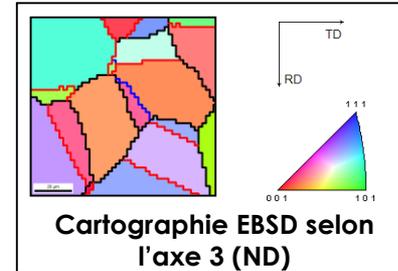
Distribution des contraintes σ_{22} pour les 2 vitesses de déformation



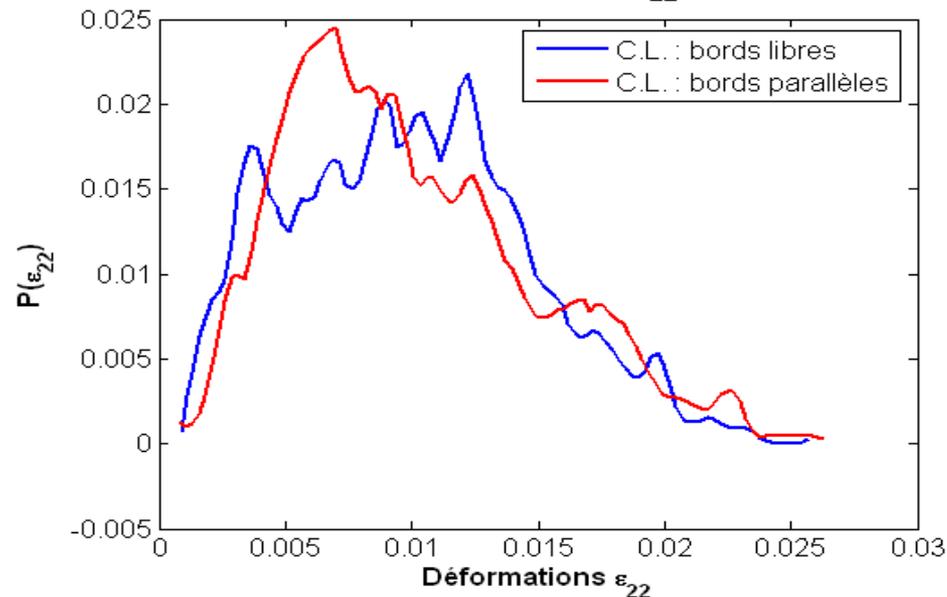
3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

Déformations ϵ_{22} pour 2 conditions limites – bords libres et bords maintenus parallèles :



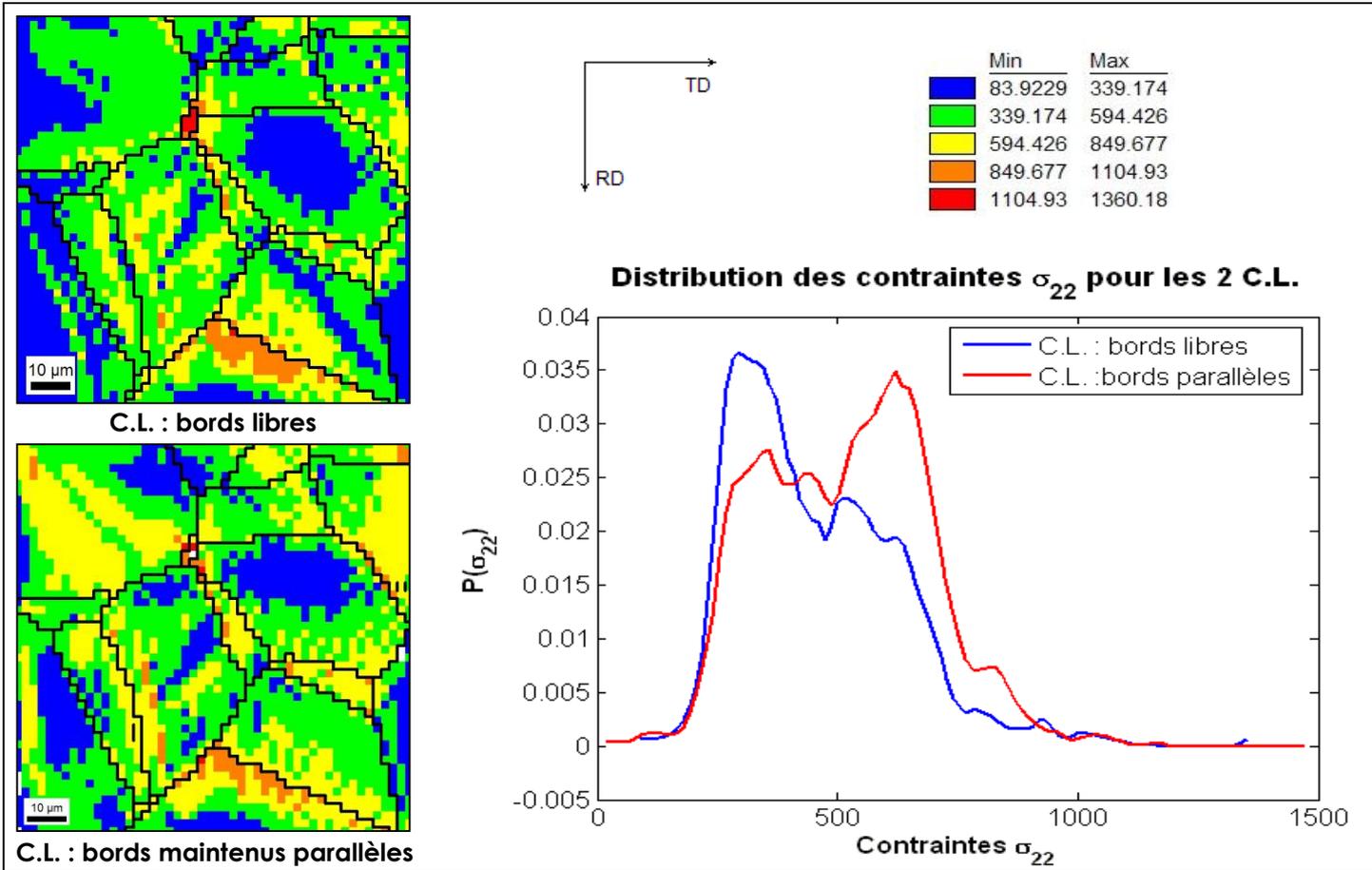
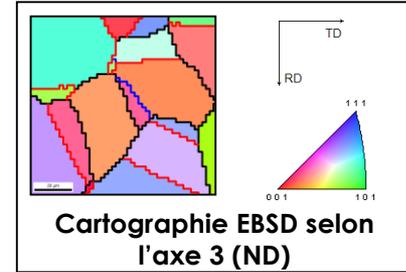
Distribution des déformations ϵ_{22} pour les 2 C.L.



3. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat « test » en acier 316L EDF-CEA (suite)

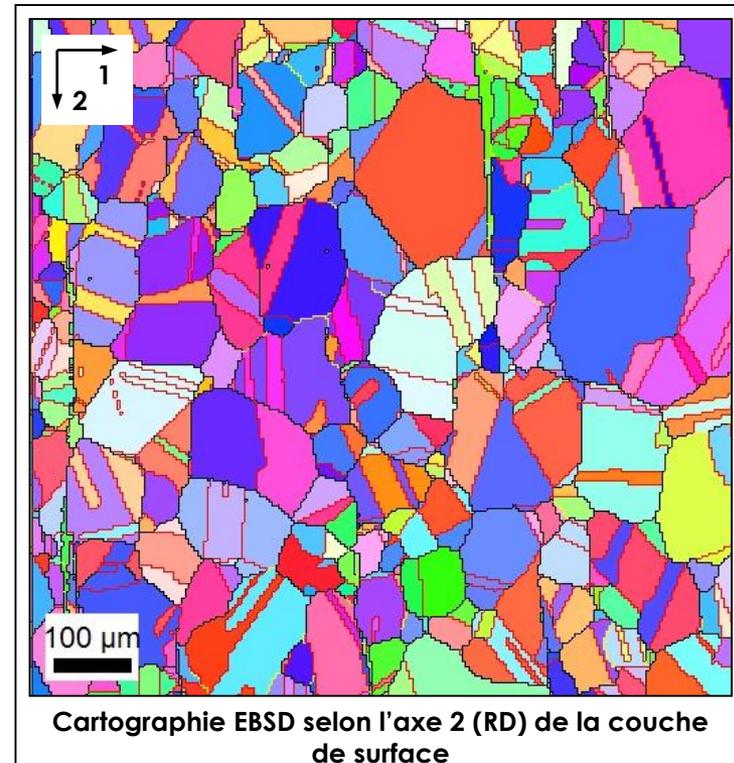
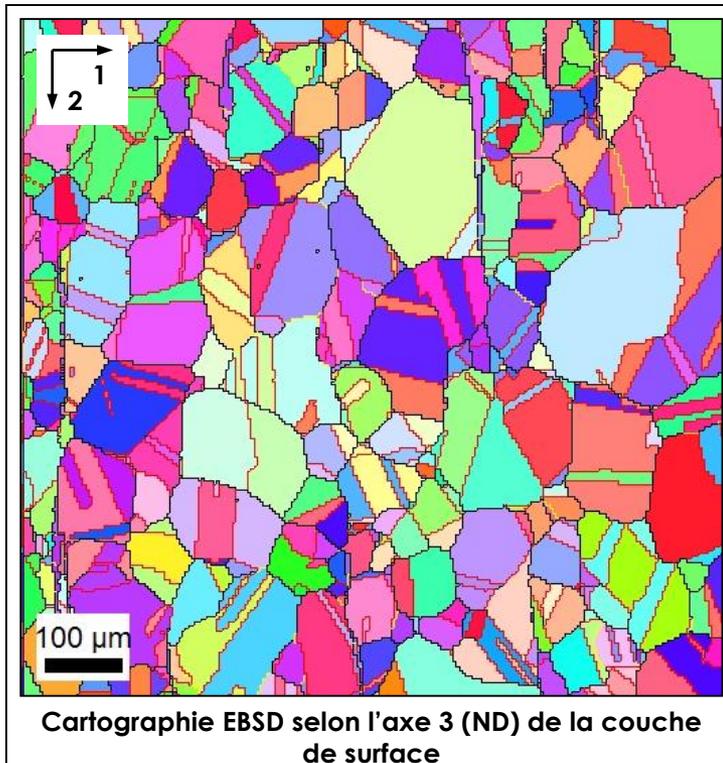
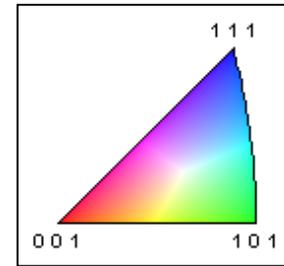
Contraintes σ_{22} pour 2 conditions limites – bords libres et bords maintenus parallèles :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier 316L EDF-CEA - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments

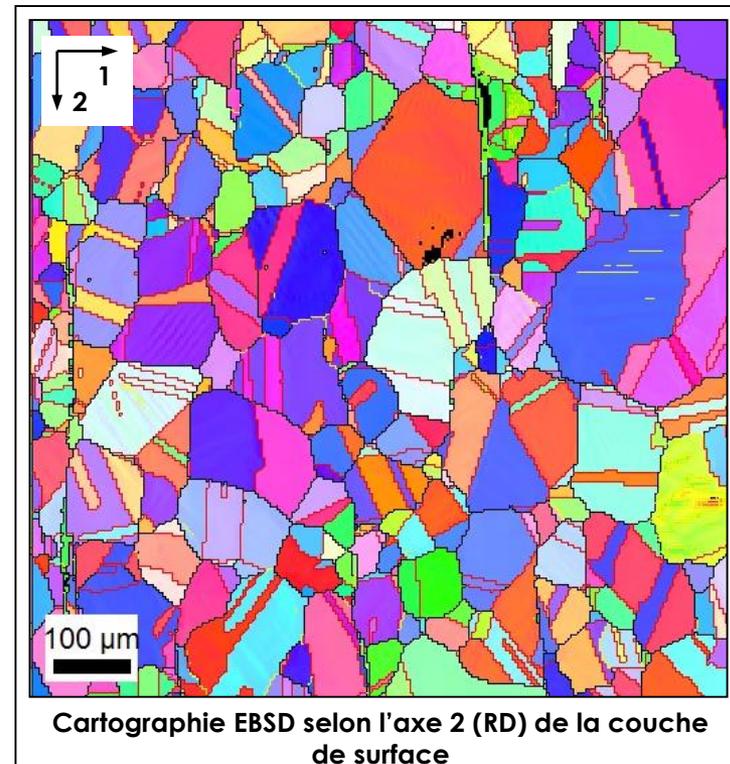
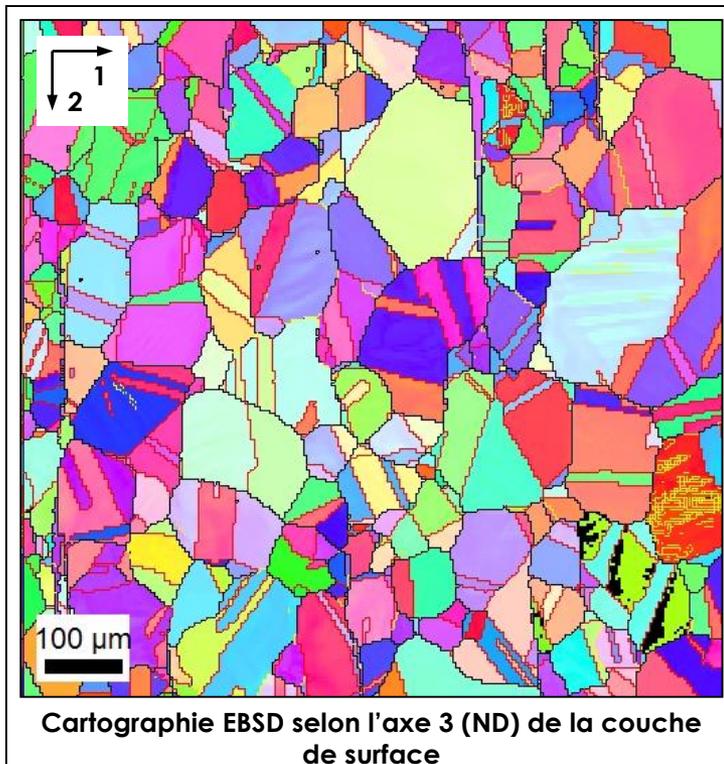
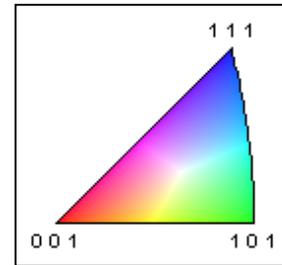
Cartographie EBSD **avant déformation** :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier 316L EDF-CEA - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments (suite)

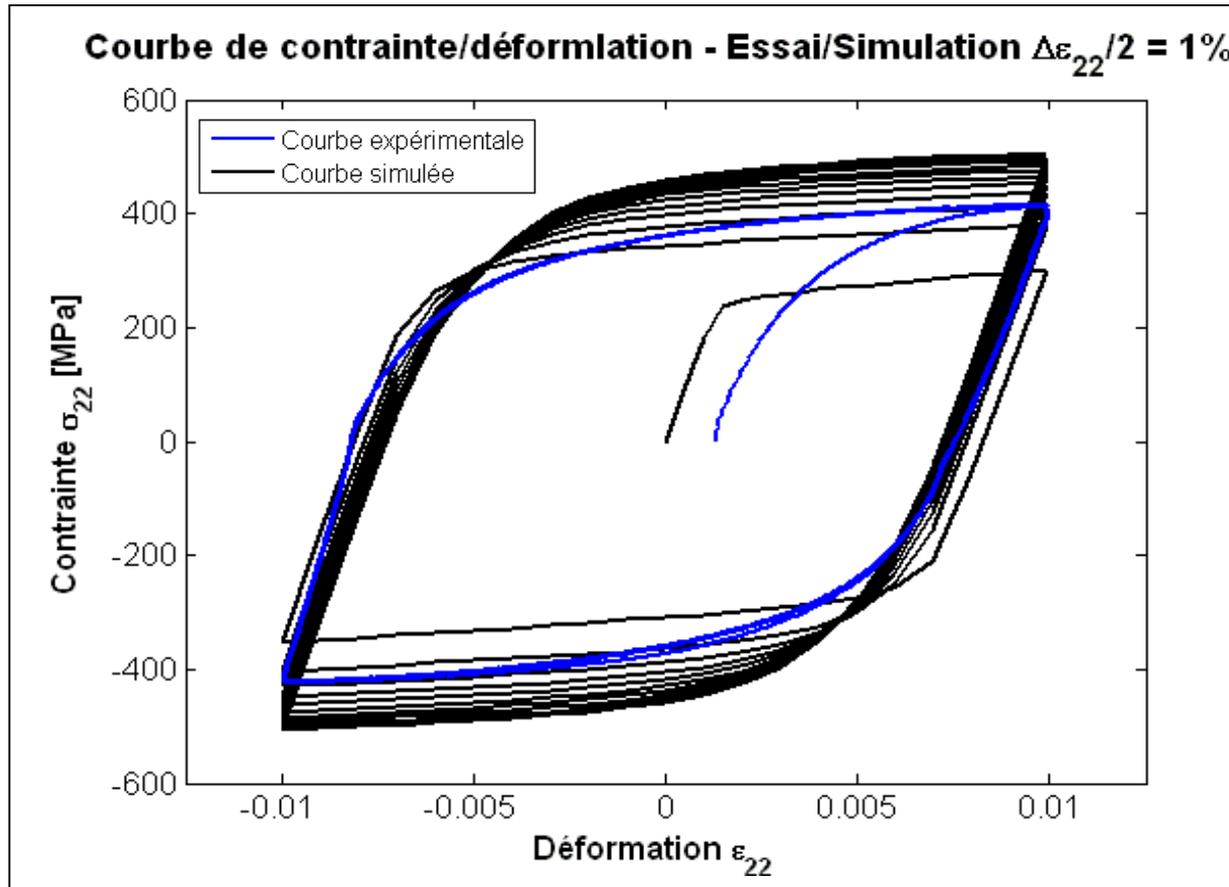
Cartographie EBSD après 10 cycles :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier 316L EDF-CEA - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments (suite)

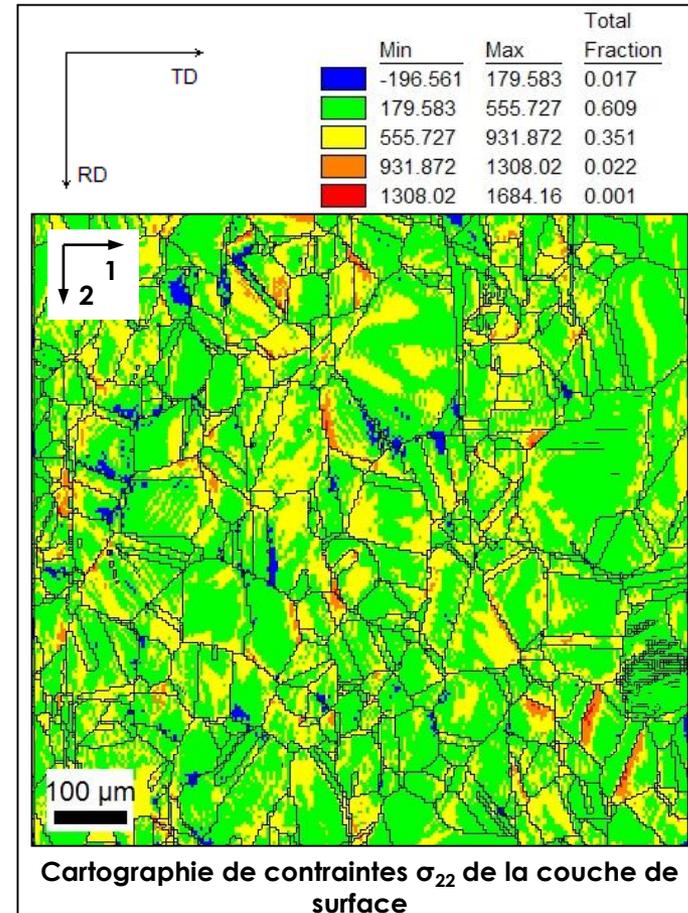
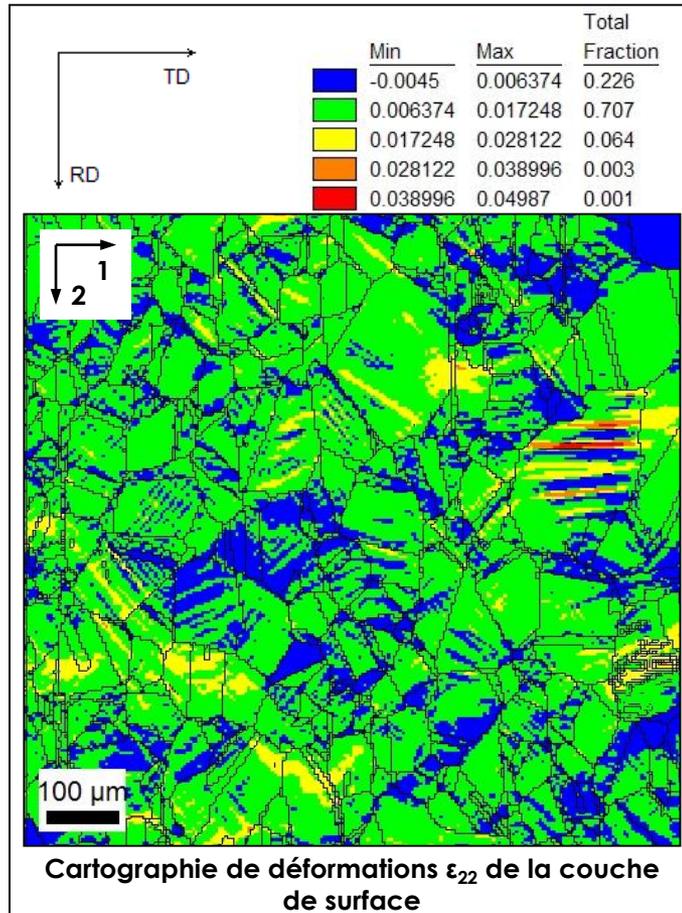
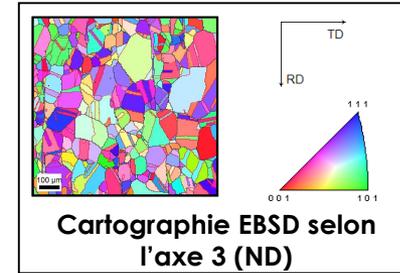
Courbe de contrainte/déformation expérimentale et simulée **après 10 cycles** :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier 316L EDF-CEA - 900 x 900 μm^2 (suite)

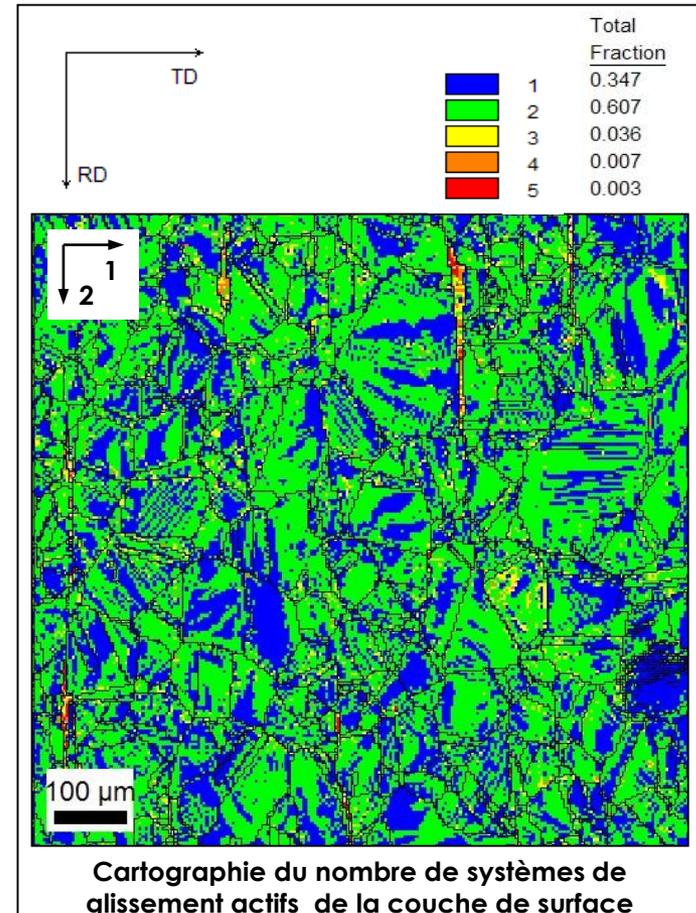
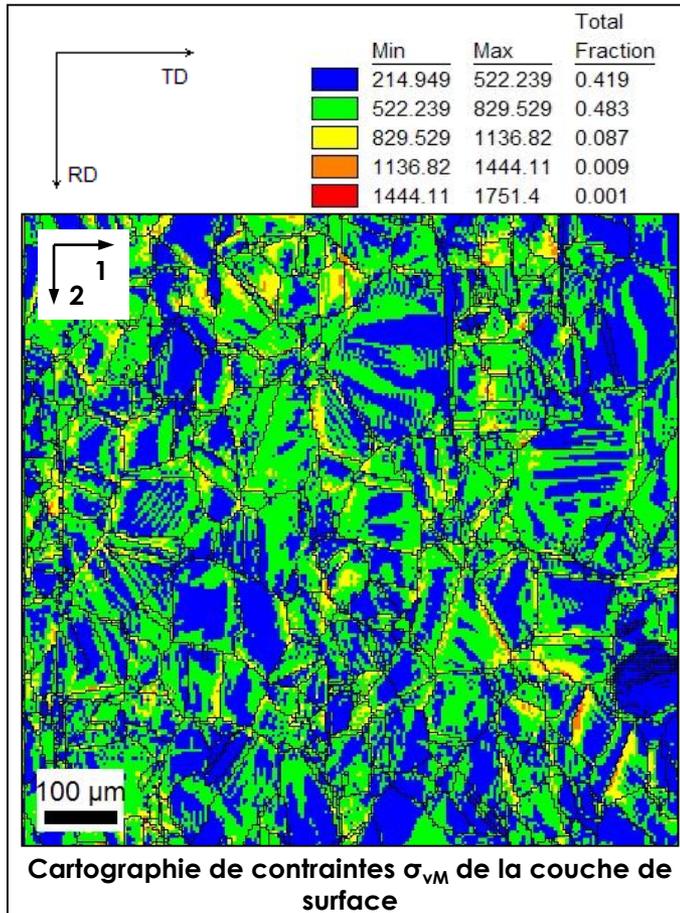
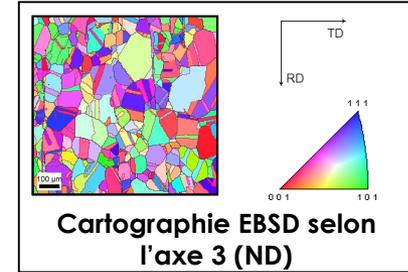
Cartographie de déformations ϵ_{22} et de contraintes σ_{22} après 10 cycles :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier 316L EDF-CEA - 900 x 900 μm^2 (suite)

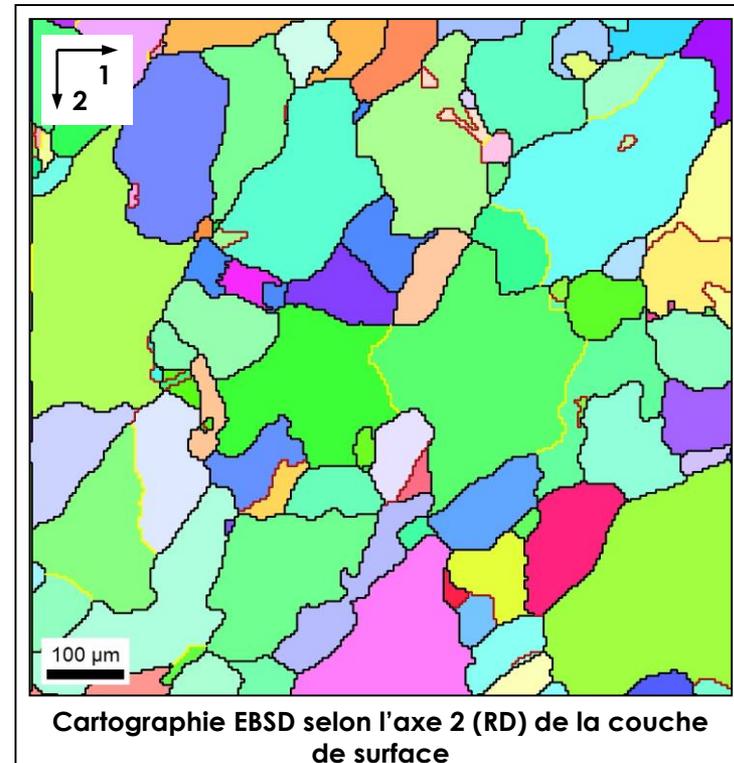
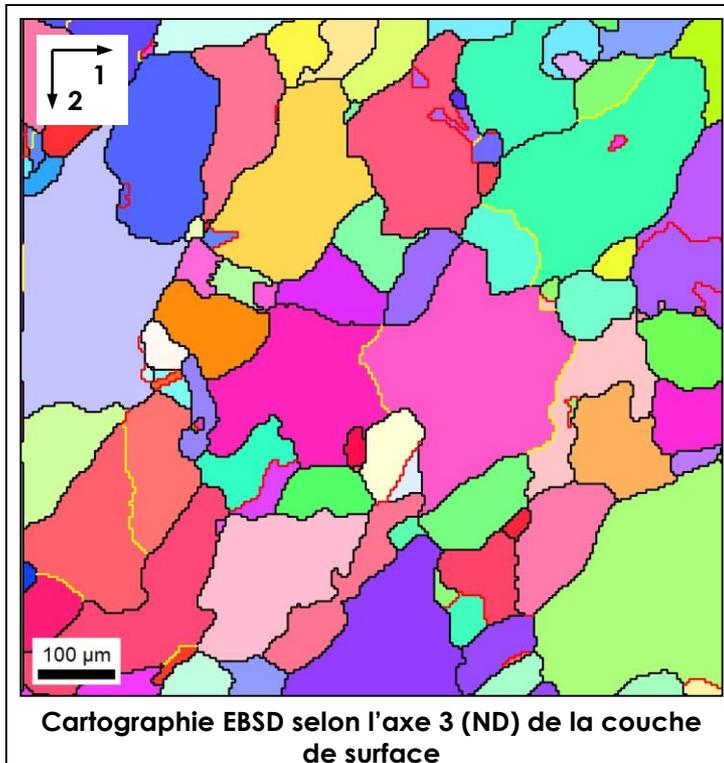
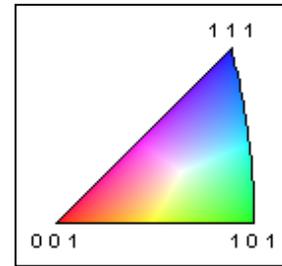
Cartographie de contraintes σ_{VM} et du nombre de systèmes de glissement actifs après 10 cycles :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier IF - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments

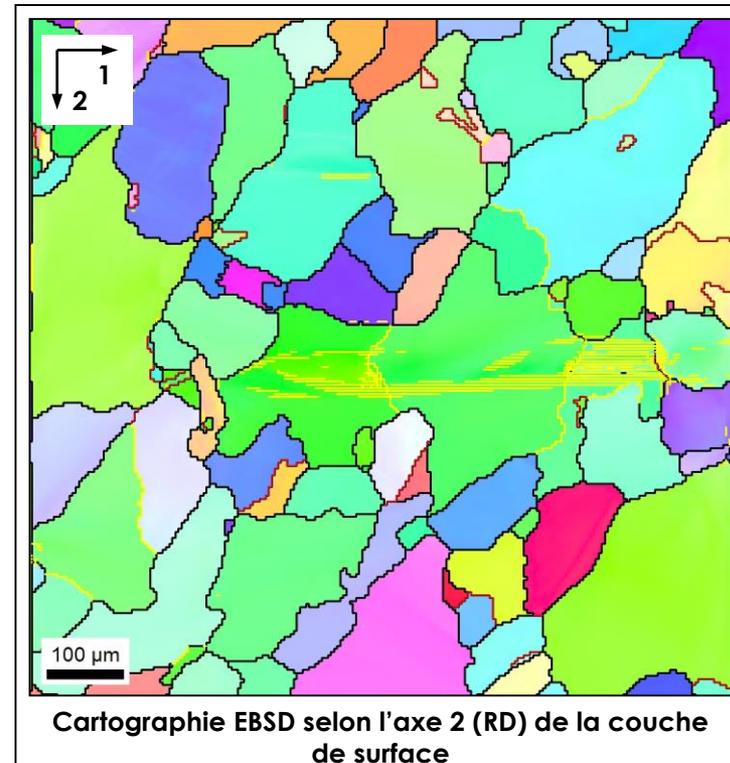
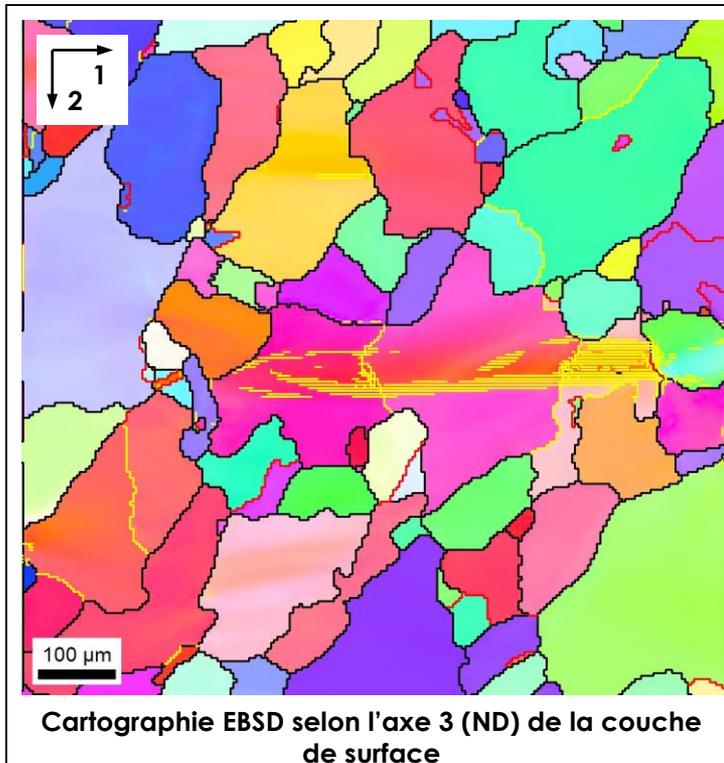
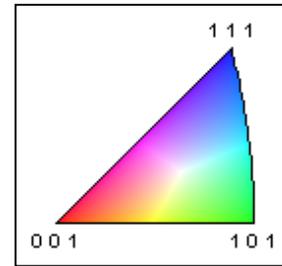
Cartographie EBSD **avant déformation** :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier IF - $900 \times 900 \mu\text{m}^2$ - 202500 éléments (suite)

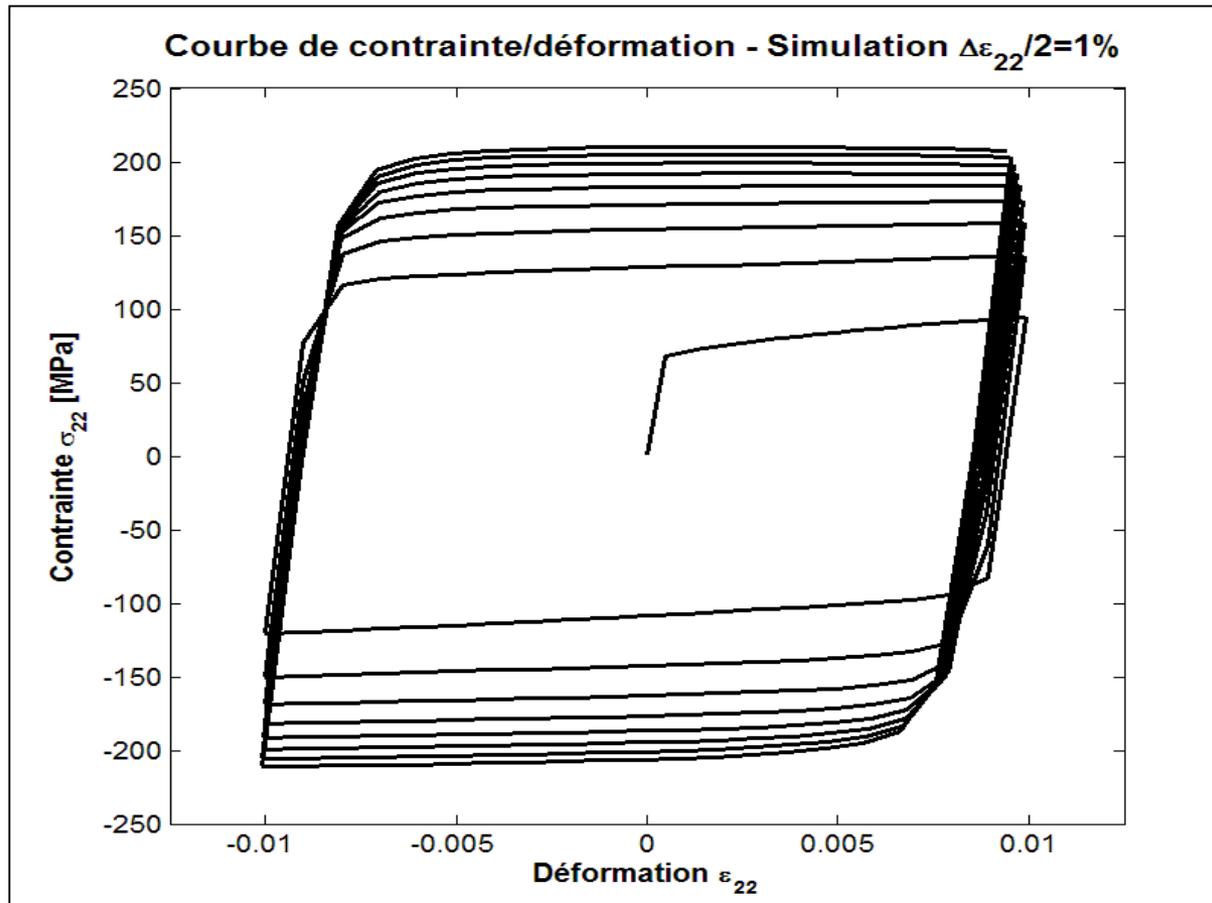
Cartographie EBSD après 10 cycles :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier IF - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments (suite)

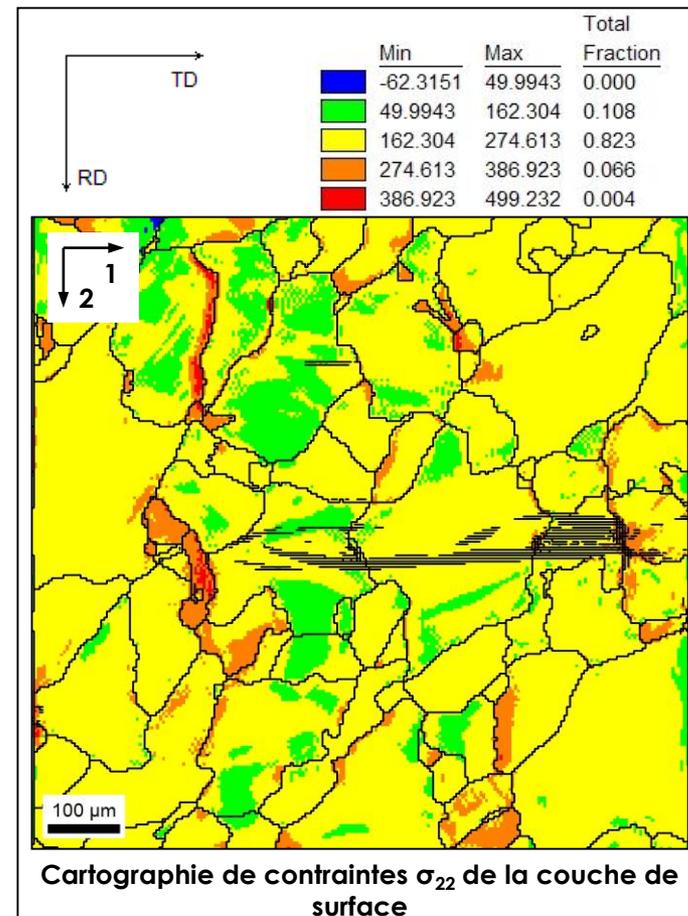
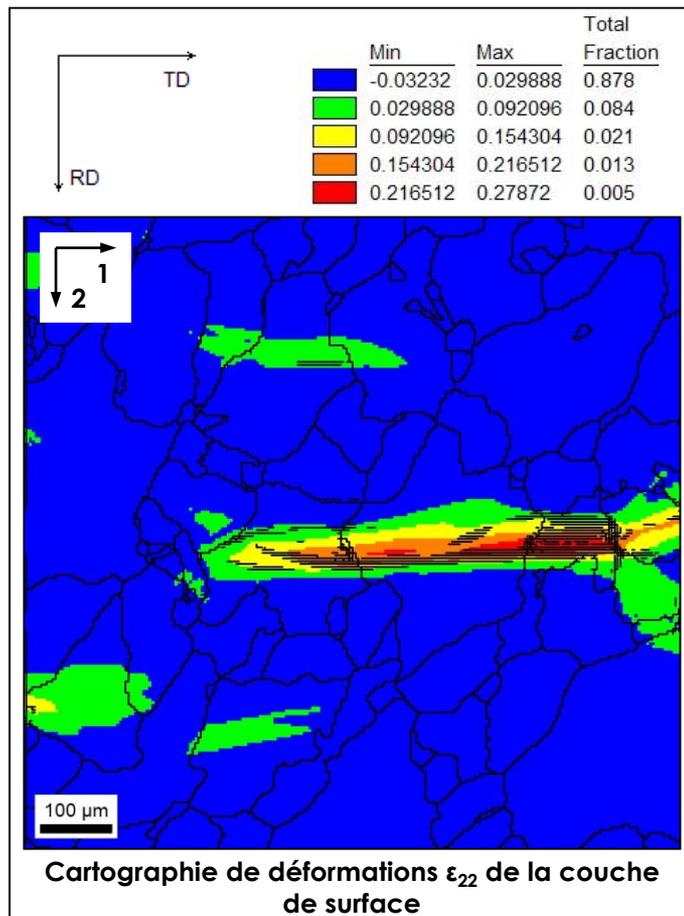
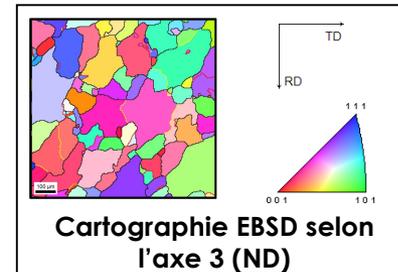
Courbe de contrainte/déformation expérimentale et simulée **après 10 cycles** :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier IF - 900 x 900 μm^2 (suite)

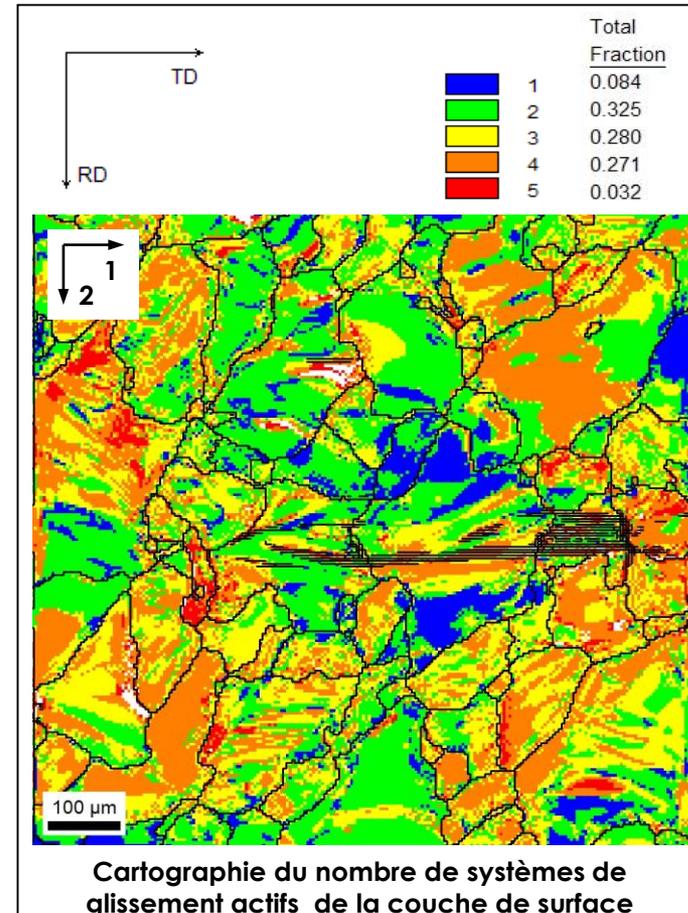
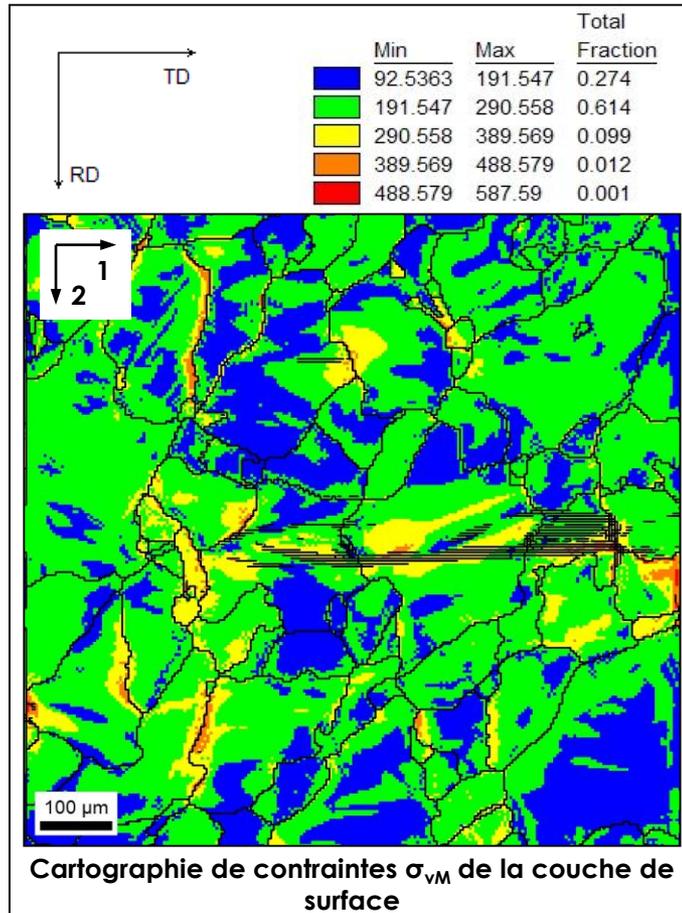
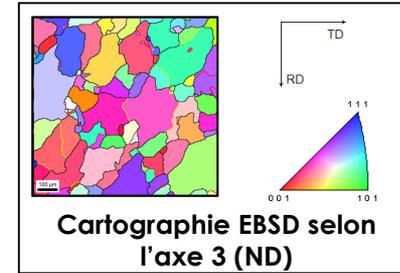
Cartographie de déformations ϵ_{22} et de contraintes σ_{22} après 10 cycles :



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier IF - 900 x 900 μm^2 (suite)

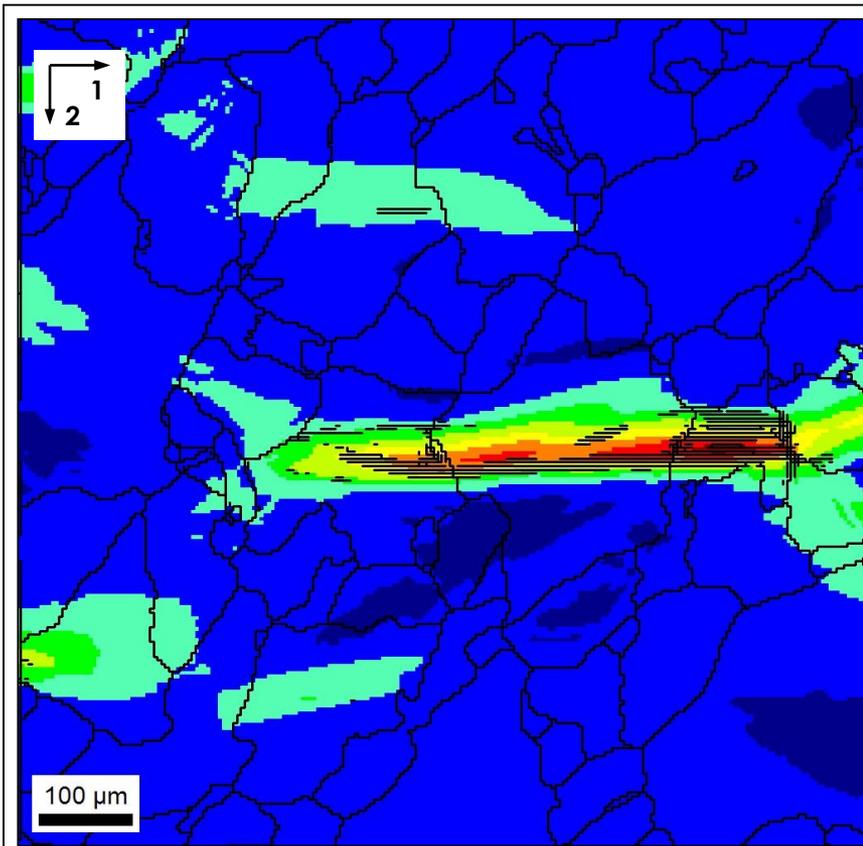
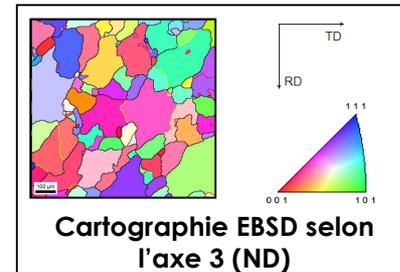
Cartographie de contraintes σ_{VM} et du nombre de systèmes de glissement actifs après 10 cycles :



4. Travaux numériques

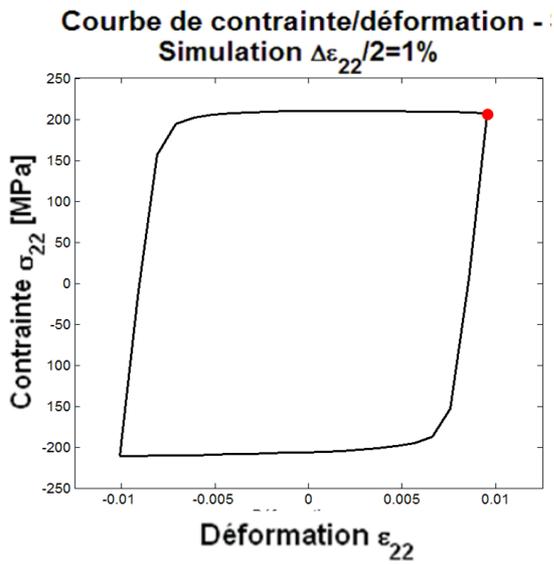
Résultats de la simulation sur un agrégat en acier
IF - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments

Évolution des déformations ϵ_{22} au cours du dernier cycle :



Cartographie de déformations ϵ_{22} de la couche de surface

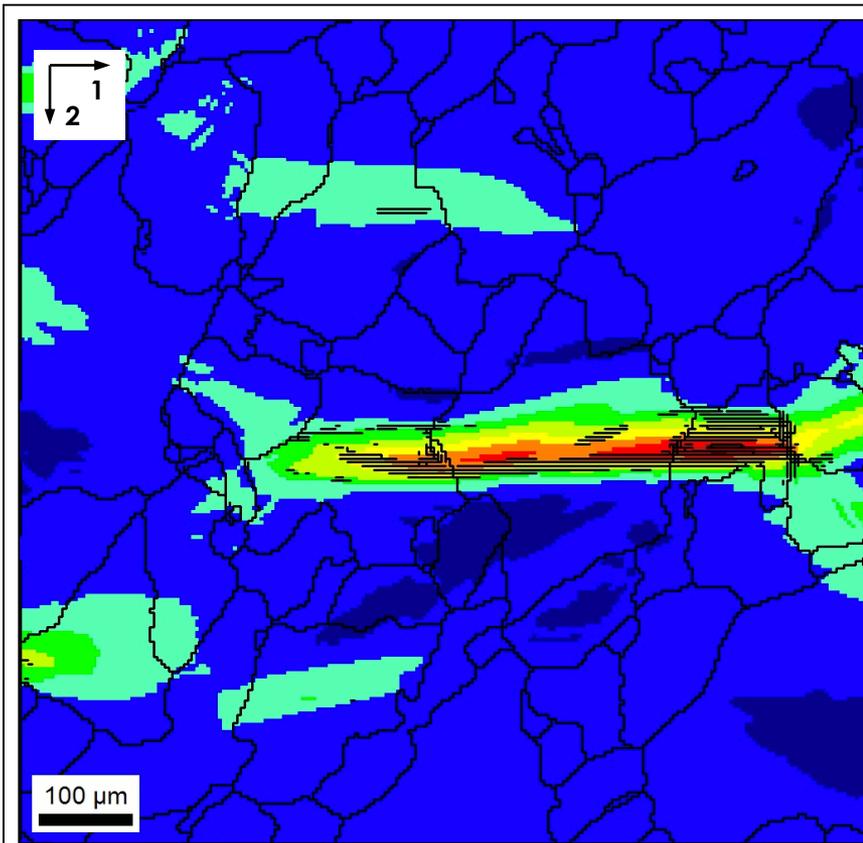
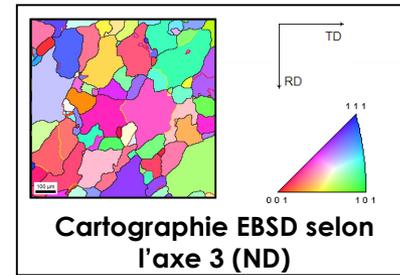
	Min	Max	Total Fraction
Dark Blue	-0.05269	-0.0159	0.054
Blue	-0.0159	0.0209	0.778
Cyan	0.0209	0.0577	0.111
Green	0.0577	0.0945	0.023
Light Green	0.0945	0.1313	0.014
Yellow	0.1313	0.1681	0.009
Orange	0.1681	0.2049	0.007
Red	0.2049	0.2417	0.004
Dark Red	0.2417	0.2785	0.001



4. Travaux numériques

Résultats de la simulation sur un agrégat en acier
IF - 900 x 900 μm^2 - 202500 éléments

Évolution des déformations ϵ_{22} au cours du dernier cycle :



Cartographie de déformations ϵ_{22} de la couche de surface

	Min	Max	Total Fraction
Dark Blue	-0.05269	-0.0159	0.054
Blue	-0.0159	0.0209	0.778
Light Green	0.0209	0.0577	0.111
Green	0.0577	0.0945	0.023
Yellow-Green	0.0945	0.1313	0.014
Yellow	0.1313	0.1681	0.009
Orange	0.1681	0.2049	0.007
Red-Orange	0.2049	0.2417	0.004
Dark Red	0.2417	0.2785	0.001

Courbe de contrainte/déformation - Simulation $\Delta\epsilon_{22}/2=1\%$

