

Calculs de microstructures en fatigue : pourquoi, comment et avec quels résultats ?

**N. Saintier^a, A. Hor^{a,b}, C. Robert^c,
R. Guerchais^{a,c}, T. Palin-luc^a, F. Morel^c**

nicolas.saintier@ensam.eu

- a. Arts et Metiers ParisTech, I2M – CNRS UMR 5295
- b. Université de Toulouse, ISAE-SUPAERO; ICA – CNRS UMR 5312
- c. Arts et Metiers ParisTech, LAMPA

Résumé

Le développement du calcul de microstructures permet depuis quelques années de prendre en compte explicitement les hétérogénéités microstructurales dans les calculs numériques et ouvre de nouvelles perspectives pour le développement de critères de fatigue sensibles à ces hétérogénéités. Ceci constitue un enjeu crucial pour l'industrie et le monde académique car de telles méthodes, en se développant, permettraient, par exemple, d'identifier des microstructures optimisées pour la tenue en service des structures sous chargements de fatigue ou de faire le lien avec la modélisation des procédés et de fermer la boucle du dimensionnement : procédé /matériau/durabilité.

Mots clés : calcul de microstructure, anisotropie, valeurs extrêmes

1. Introduction

Dans leur grande majorité, les méthodes de calcul de durée de vie en fatigue oligo et polycyclique se basent sur la mise en équation (de manière plus ou moins empirique) de quantités mécaniques calculées à l'échelle macro ou méso. La pertinence des quantités choisies étant validée par la capacité du modèle à reproduire fidèlement les résultats expérimentaux. La mise au point de tels modèles n'est pas aisée si l'on considère la complexité des chargements qui font l'objet des études actuelles : chargements multiaxiaux d'amplitude variable, couplage LCF-HCF, etc. Bien que les échelles des mécanismes d'endommagement impliqués dans les processus d'amorçage de fissures en fatigue soient relativement bien identifiées (échelle des grains, des bandes de glissement) leur prise en compte explicite dans les modèles de fatigue est encore peu développée. D'autre part, les méthodes actuelles ne permettent pas de prendre en compte la microstructure si ce n'est de manière empirique et généralement ad-hoc. Si l'on considère le simple effet de texture, par exemple, tous paramètres microstructuraux constants par ailleurs, on sait que la prise en compte de la texture dans le dimensionnement passera la plupart du temps par l'identification du comportement en fatigue et la modification des paramètres du critère étudié alors que les mécanismes eux sont invariants. Nous présentons ici quelques éléments des approches proposées pour la prise en compte des microstructures dans le calcul en fatigue par la méthode des valeurs extrêmes, la présentation offrant un point de vue plus général sur d'autres méthodologies.

2. Modélisation de microstructures

2.1 Microstructures numériques

Les outils de génération de microstructures sont maintenant relativement nombreux et les capacités de calculs actuels permettent couramment de calculer des agrégats d'une taille de 300 à 1000 grains en fonction du type de calculs (2D/3D) et de la nature des lois de comportement. Ces modèles numériques permettent également d'aborder les problématiques de surface libre, de rugosités de surface et de défauts au sein des microstructures ainsi que pour l'analyse du comportement en fatigue de structures dont les caractéristiques dimensionnelles sont proches de celles de la microstructure.

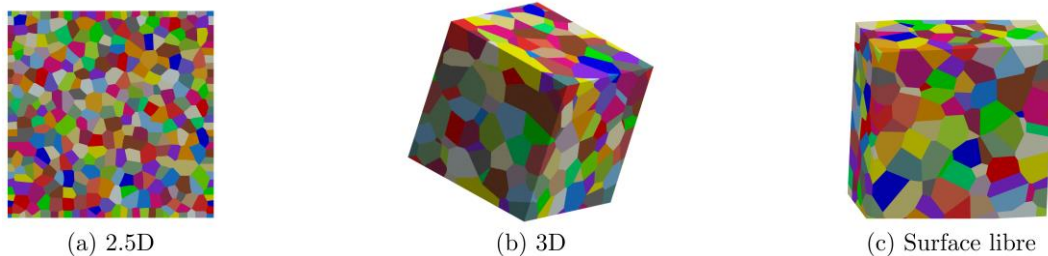


Figure 1. Modélisations d'agrégats polycristallins : (a) 2D périodique avec hypothèse des déformations planes généralisées, (b) 3D périodique, (c) 3D semi-périodique avec surface libre.

2.2 Lois de comportement à l'échelle du cristal

On peut regrouper les modèles monocristallins en 2 grandes familles : modèles physiques ou quasi-physiques et modèles phénoménologiques. Ces familles de modèles se distinguent sur la base des variables internes utilisées dans leur formulation. Les variables internes des modèles quasi-physiques sont basées sur les densités de dislocations alors que celles des modèles phénoménologiques sont basées sur l'écoulement du matériau. Le modèle de Meric et Cailletaud [1], présenté par la suite, fait partie des modèles phénoménologiques monocristallins les plus utilisés.

Ces modèles monocristallins sont basés, pour la plupart, sur la vitesse de déformation plastique sommée sur l'ensemble des systèmes de glissement du cristal. Ainsi, la déformation plastique totale $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{pl}$ provient de la somme des contributions plastiques sur tous les systèmes de glissement possibles du matériau. La formulation en vitesse est donnée par :

$$\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{pl} = \sum_s \dot{\gamma}^s \underline{\underline{m}}^s \quad (1)$$

où $\dot{\gamma}^s$ désigne la vitesse de glissement plastique sur le système de glissement s et $\underline{\underline{m}}^s = \frac{1}{2}(\underline{\underline{n}}^s \otimes \underline{\underline{l}}^s + \underline{\underline{l}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s)$ le tenseur de Schmid du système s caractérisé par la normale unitaire $\underline{\underline{n}}^s$ au plan de glissement et la direction de glissement, de vecteur unitaire $\underline{\underline{l}}^s$.

Une formulation en vitesse est utilisée pour aider au choix des systèmes de glissement (régularisation induite par la viscosité). Cette formulation fait ainsi intervenir une loi d'écoulement viscoplastique de type Norton, intégrant 2 termes r^s (écrouissage isotrope) et x^s (écrouissage cinématique), la vitesse de glissement plastique $\dot{\gamma}^s$ sur le système s s'écrivant sous la forme :

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{\|\tau^s - x^s\| - r^s}{K} \right\rangle \text{sign}(\tau^s - x^s) = \dot{\nu}^s \text{sign}(\tau^s - x^s) \quad (2)$$

où K et n sont les paramètres du matériau traduisant la viscosité. Les lois d'évolution des écrouissages sont de type non linéaire, traduisant l'augmentation de la cission critique sur un système, avec le glissement plastique sommé sur tous les autres systèmes de glissement. Les lois d'évolution des écrouissages cinématique et isotrope s'écrivent :

- Écrouissage isotrope :

$$r^s = \tau_0 + Q \sum_r h^{rs} (1 - \exp\{-b\nu^s\}) \quad (3)$$

où τ_0 est la cission résolue initiale, Q et b sont respectivement la capacité et la vitesse d'écrouissage isotrope et h^{rs} est la matrice d'interaction entre les systèmes de glissement. ν^s est tel que :

$$\dot{\nu}^s = |\dot{\gamma}^s| \quad (4)$$

- Écrouissage cinématique :

$$x^s = c\alpha^s \quad (5)$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\dot{\nu}^s\alpha^s \quad (6)$$

où c et d sont les paramètres décrivant la capacité et la vitesse d'écroissage cinématique.

L'interaction entre les systèmes de glissement est prise en compte dans le modèle à travers la matrice d'interaction h^{rs} . Les travaux de de Hirth [2] et de Franciosi [3,4] ont permis de décrire cette matrice d'interaction à l'aide de 6 coefficients pour un CFC avec la prise en compte des symétries du cristal. Les interactions entre un système et les autres sont traduits par les coefficients h^{rs} .

Pour le modèle phénoménologique de Méric et Cailletaud, la matrice d'interaction est identifiée par méthode inverse à partir de calculs d'agrégats et/ou de modèles d'homogénéisation. L'identification de ces coefficients est très délicate du point de vue expérimentale comme numérique. Si les lois de comportement sont bien établies dans le cas de niveaux de déformation importants, leur extension vers des niveaux de déformation faible reste une difficulté majeure lorsque l'on cherche à évaluer les champs mécaniques locaux en fatigue à grande durée de vie.

2.3 Notion de VER

La définition d'un VER est toujours délicate et ne peut se faire que dans un contexte particulier, sa taille étant dépendante du phénomène physique observé. Dans le cas du comportement mécanique des matériaux, la taille du VER au sens du comportement est différente de la taille du VER au sens de la fatigue. La résistance en fatigue dans le domaine HCF est souvent dominée par l'amorçage de fissures. La microstructure joue un rôle essentiel dans cet amorçage de fissures de fatigue. Cette sensibilité du comportement en fatigue à la microstructure ne peut être évaluée à travers la simple analyse des distributions des champs de contrainte et de déformation à ces mêmes échelles. En effet, les processus d'amorçage à grande durée de vie sont principalement liés à la réponse des zones (grains et leur voisinage) les plus critiques : c'est la réponse des extrêmes (au sens de la fatigue) qui pilote la réponse macroscopique du matériau. Les processus d'amorçages ne constituent donc pas la réponse "en moyenne" de l'agrégat mais plutôt une réponse de type "maillon le plus faible". L'application du critère de Dang Van à l'échelle de la microstructure est illustrée dans la figure 2. Chaque point du diagramme représente la projection, dans le repère du critère, de l'état de contrainte moyenné dans un grain de l'agrégat. Il est possible d'identifier pour chaque microstructure calculée un grain critique qui correspond au grain le plus chargé au sens du critère (présentant le coefficient de danger le plus élevé). Il apparaît alors clairement que le grain considéré comme critique est dépendant du jeu d'orientations, de la morphologie et de leur environnement.

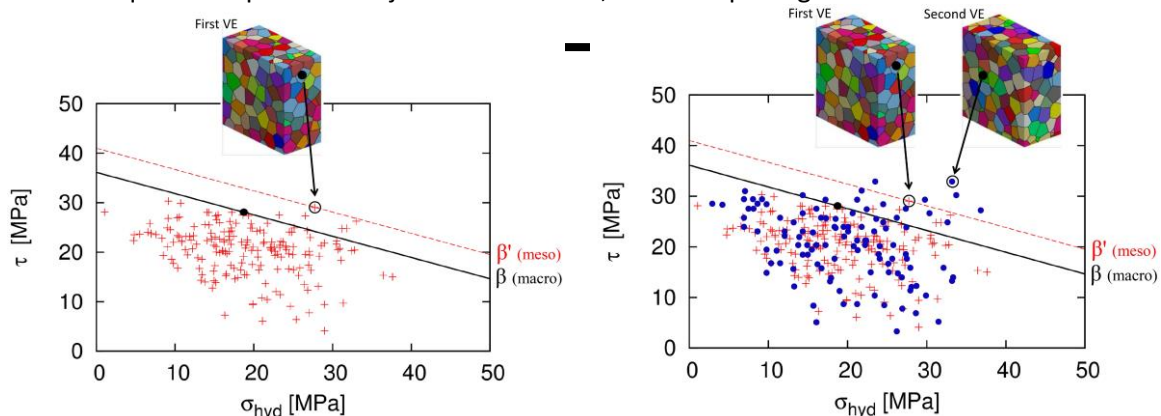


Figure 2. Application du critère de Dang Van à l'échelle de la microstructure : sensibilité à la discrétisation spatiale et au jeu d'orientation.

Il n'est donc pas possible de considérer un agrégat comme représentatif du comportement en fatigue du matériau, même si la taille de l'agrégat est suffisante pour être considéré comme VER au sens du comportement. Pour cette raison, le VER au sens de la fatigue (s'il existe) est suffisamment large pour ne pas être accessible par le calcul. Afin de pallier à cette difficulté, des stratégies de calcul spécifiques doivent être mises en place.

Les processus d'endommagement par fatigue étant associés aux valeurs extrêmes de l'endommagement au sein de la microstructure, des outils de statistique des valeurs extrêmes (événements rares) ont été utilisés dans la littérature pour l'évaluation du comportement en fatigue des matériaux métalliques pour différents types de matériaux [5, 8, 10, 12].

2.4 Statistique des valeurs extrêmes

Soit X une variable aléatoire (VA) de fonction de répartition $F_X(x) = P(X \leq x)$. Les n réalisations extrêmes dans n échantillons de la VA X peuvent être définies comme suit :

$$Y_n = \max(X_1, X_2, \dots, X_n) \quad (7)$$

La fonction de distribution de Y_n est définie en x de la manière suivante :

$$F_{Y_n}(y) \equiv P(Y_n \leq y) = P(X_1 \leq y, X_2 \leq y, \dots, X_n \leq y) \quad (8)$$

D'après le théorème de Fisher-Tippett, s'il existe deux suites réelles normalisant $(a_n)_{n \geq 1} > 0$ et $(b_n)_{n \geq 1}$ et une distribution non-dégénérée (non réduite à 1 point) G telles que :

$$P\left(\frac{Y_n - b_n}{a_n} \leq x\right) = F^n(a_n x + b_n) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} G(x) \quad (9)$$

Alors la fonction de répartition G est nécessairement de l'un des trois types suivants : Fréchet, Weibull ou Gumbel. Jenkinson [13] a proposé une seule forme paramétrique (équation 10) appelée fonction des valeurs extrêmes généralisée (GEV). Elle regroupe les trois lois limites précédentes et dépend d'un seul paramètre ξ , appelé indice extrême ou facteur de forme de la distribution :

$$G_\xi(x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{1 + \xi x}{\xi}\right) & \text{si } \xi \neq 0, \forall x / 1 + \xi x > 0 \\ \exp(-\exp(-x)) & \text{si } \xi = 0 \end{cases} \quad (10)$$

Le signe de ξ renseigne sur le type de la loi : la fonction de distribution est de type Gumbel si $\xi = 0$, de type Fréchet si $\xi > 0$ ou de type Weibull si $\xi < 0$. La variable $X = (Y_n - b_n)/a_n$ est le maximum normalisé de la VA X . Les paramètres a_n et b_n sont appelés facteurs d'échelle de la distribution. Ces paramètres sont identifiées sur un ensemble de résultats de calculs comme illustré figure 3.

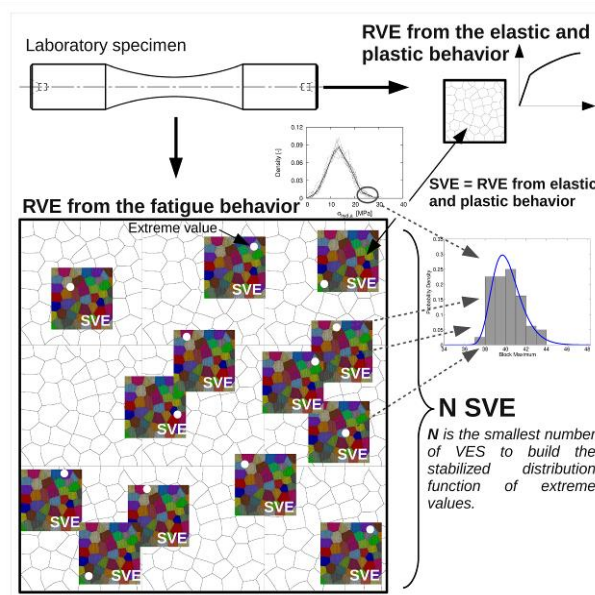


Figure 3. Application de la méthodologie globale de calcul

La suite de l'article présente les résultats de ce type d'analyse pour l'étude de l'effet de l'anisotropie élastique et de surface libre sur le comportement en fatigue de matériaux de type CFC.

3. Exemple d'application

En termes de géométrie, les agrégats sont constitués d'un ensemble de 300 grains modélisés avec une tessellation de Voronoï. La périodicité est assurée en réalisant une copie des germes suivant les directions périodiques avant de réaliser la tessellation. Les polyèdres sont ensuite discrétisés avec des éléments triangulaires à 3 nœuds dans le cas 2D, et des tétraèdres à 4 nœuds pour les géométries en 3D. Pour les cas 2D et 3D périodiques, la dimension des volumes est unitaire, pour la modélisation de la surface libre, les dimensions sont unitaires suivant les directions périodiques, et de 0.5 dans l'épaisseur. Un exemple des différentes modélisations est présenté sur la figure 1. Chacun de ces maillages est associé à 8 jeux d'orientation de texture isotrope. Chaque jeu d'orientation est composé de 300 triplets d'angles d'Euler qui définissent l'orientation du cristal dans le repère de référence de l'agrégat. Chaque matériau est représenté par un ensemble de 24 VES (3 géométries × 8 jeux d'orientation). Les agrégats sont calculés sous chargement alterné symétriques de traction et de torsion. Le chargement appliqué correspond à la limite de fatigue médiane à 10^7 cycles. Le rapport entre la limite d'endurance en torsion et celle en traction est supposée identique (0.64) pour les trois matériaux étudiés (Aluminium, Cuivre, Nickel) et à été identifié expérimentalement dans les travaux de Lukàš and Kunz [14]. Les simulations sont réalisées avec le code de calcul par éléments finis ZéBuLoN, développé conjointement par le centre des matériaux de l'École des Mines ParisTech, Northwest Numerics et l'ONERA.

En fatigue à grand nombre de cycles, on s'intéresse principalement au grain critique dont la réponse mène à des valeurs maximales du coefficient de danger au sens d'un critère de résistance. Ces valeurs extrêmes se situent au niveau des queues des fonctions de densité de probabilité des réponses mésoscopiques et sont fortement sensibles à la microstructure. A titre d'exemple, le critère de Findley [15] est utilisé à l'échelle mésoscopique pour prédire le grain critique à la tenue en fatigue à grands nombre de cycles. Ce critère postule une relation linéaire entre l'amplitude de la cission et la contrainte normale maximale. A l'échelle mésoscopique, il peut s'écrire comme suit :

$$\max_s (\tau_{r,a}^s + \alpha \sigma_{ns,\max}) \leq \beta \quad (11)$$

où $\tau_{r,a}^s$ est l'amplitude de la cission résolue sur le système de glissement s , $\sigma_{ns,\max}$ la contrainte normale maximale au cours du cycle sur le système s . α et β sont deux paramètres qui dépendent des limites de fatigue en traction et en torsion. Pour étudier ces grains critiques l'analyse est basée sur la probabilité des valeurs extrêmes qui consiste à déterminer la distribution statistique des valeurs maximales du coefficient de danger du critère de Findley ainsi que de l'amplitude de la cission résolue et de la contrainte normale maximale de chaque VES. Trois matériaux sont considérés, le cuivre, l'aluminium et le nickel.

La figure 4 illustre les résultats obtenus, en terme d'amplitude de la cission résolue et de la contrainte normale au plan de glissement associé, pour l'ensemble des systèmes de glissements simulés (8 jeux d'orientation × 3 topologies de microstructures × 300 grains × 12 systèmes). Le chargement est de la traction purement alternée. Les points rouges représentent le couple des valeurs maximales du coefficient de danger du critère de Findley, pour chacun des VES, ce sont les données d'entrée pour la statistique des valeurs extrêmes.

Une augmentation de la dispersion du maximum de la contrainte normale au plan de glissement est observée avec une anisotropie croissante. En ce qui concerne l'amplitude de la cission résolue, la dispersion reste moins prononcée. Au niveau de la réponse mésoscopique du critère de Findley, la réponse des grains critiques de chaque VES est nettement plus dispersée pour le cuivre (forte anisotropie) que pour l'aluminium (quasi-isotrope). De plus la modélisation de la surface libre, augmente considérablement la valeur du coefficient de danger du critère de Findley du grain critique (sur l'ensemble des VES) en comparaison avec une modélisation 3D homogène (sans surface libre).

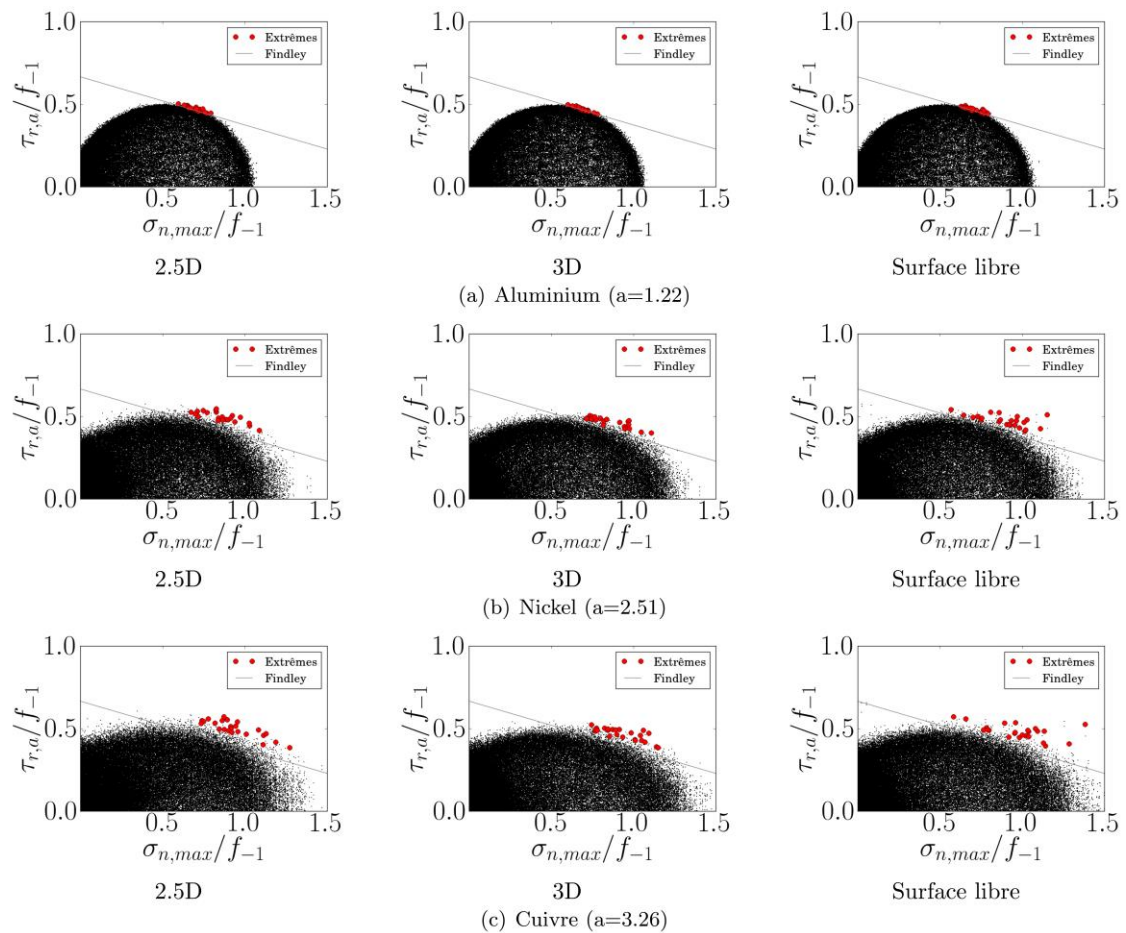


Figure 4. Couple des variables $\tau_{r,a}$ et $\sigma_{n,max}$ (normalisées par la limite en fatigue en traction f_{-1}) pour tous les systèmes de glissement (traction alternée symétrique).

La figure 5 représente les médianes (probabilité de 0.5) des distributions des valeurs extrêmes pour l'amplitude de la cission résolue, de la contrainte normale maximale et du coefficient de danger du critère de Findley. Les deux bornes des intervalles correspondent à des probabilités de 0.1 et 0.9. Deux cas de chargement y sont représentés : traction et torsion purement alternées.

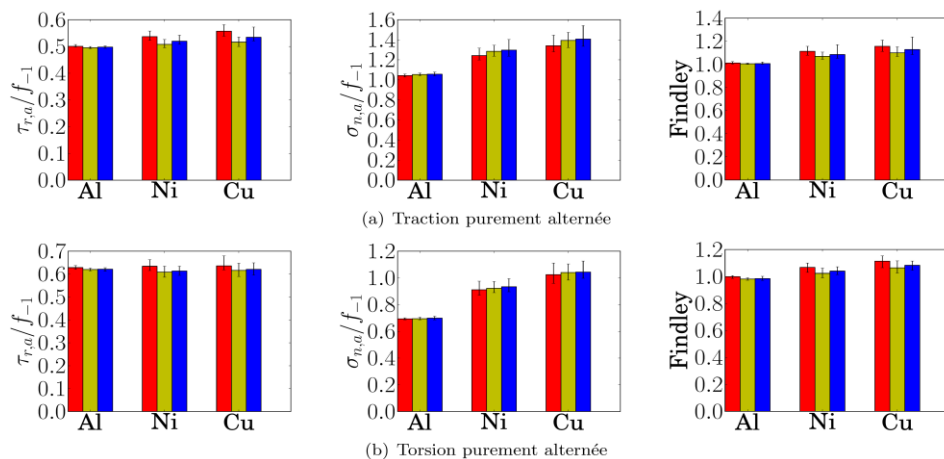


Figure 5. Evolution des médianes des valeurs extrêmes normalisées par les limites d'endurance. En rouge (barre à gauche) : modélisation en 2D, en jaune (barre au milieu) : 3D périodique et en bleu (barre à droite) : surface libre.

On note une augmentation des valeurs médianes des extrêmes des trois paramètres étudiés (amplitude de cission résolue, contrainte normale maximale et le coefficient de danger du critère de Findley) avec le coefficient d'anisotropie cubique. L'effet est bien plus faible pour la cission résolue

que pour la contrainte normale. Il est également notable que la dispersion des distributions est plus élevée avec une forte anisotropie élastique. Ces effets seront analysés plus en détail lors de la présentation.

4. Conclusions

La méthodologie proposée permet de quantifier l'effet de la microstructure sur les variables locales des critères et propose un cadre pour l'analyse des calculs en fatigue [12, 16, 17]. Dans le cadre de la présentation d'autres approches seront présentées pour rendre compte plus précisément des effets de surface et de plasticité. D'autres effets seront également discutés : les défauts, la rugosité [18,19].

Références

- [1] Meric L. and Cailletaud G., Single crystal modeling for structural calculations : Part 2 - finite element implementation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113 (1991) 171-182.
- [2] Hirth, J., On the dislocation interactions in the fcc lattice. *Journal of Applied Mechanics*, 32 (1960) 700-706.
- [3] Franciosi P., Berveiller M. and Zaoui A., Latent hardening in copper and aluminium single crystals. *Acta Metallurgica*, 28 (1980) 273-283.
- [4] Franciosi P., The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metallurgica*, 33 (1985) 1601-1612.
- [5] Gumbel, J. E. Statistical analyses of extreme values for fatigue evaluation of metals. *Revue de statistique appliquée*, 5 (1957) 51-86.
- [6] Weibull W., A statistical theory of the strength of materials. *Roy. Swed. Inst. Eng. Res.*, 1939.
- [7] Weibull W., A statistical distribution function of wide applicability. *ASME Journal of Applied Mechanics*, 18 (1951) 293-297.
- [8] Przybyla, C., Prasannavenkatesan, R., Salajegheh, N., and McDowell, D. L., Microstructure-sensitive modeling of high cycle fatigue. *International Journal of Fatigue*, 32 (2010) 512-525.
- [10] McDowell, D. and Dunne, F., Microstructure-sensitive computational modeling of fatigue crack formation. *International Journal of Fatigue*, 32 (2010) 1521-1542.
- [11] McDowell, D. L., A perspective on trends in multiscale plasticity. *International Journal of Plasticity*, 26 (2010) 1280-1309.
- [12] Anis Hor, Nicolas Saintier, Camille Robert, Thierry Palin-Luc, Franck Morel, Statistical assessment of multiaxial HCF criteria at the grain scale, *International Journal of Fatigue*, 67 (2014) 151-158,
- [13] Jenkinson, A., The frequency distribution of the annual maxima (or minimum) values of meteorological elements. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 81 (1955).
- [14] Lukás, P. and Kunz, L., Cyclic slip localization and fatigue crack initiation in fcc single crystals. *Materials Science and Engineering A.*, 314 (2001) 75–80.
- [15] Findley, W. (1959). A theory for the effect of mean stress on fatigue of metals under combined torsion and axial load or bending. *Transactions ASME*, 81(B), 301-306.
- [16] R. Guerchais, C. Robert, F. Morel, N. Saintier, Micromechanical study of the loading path effect in high cycle fatigue, *International Journal of Fatigue*, 59 (2014) 64-75.
- [17] C. Robert, N. Saintier, T. Palin-Luc, F. Morel, Micro-mechanical modelling of high cycle fatigue behaviour of metals under multiaxial loads, *Mechanics of Materials*, 55 (2012) 112-129.
- [18] R. Guerchais, N. Saintier, F. Morel, C. Robert, Micromechanical investigation of the influence of defects in high cycle fatigue, *International Journal of Fatigue*, 67 (2014) 159-172.
- [19] R. Guerchais, F. Morel, N. Saintier, Effect of defect size and shape on the high-cycle fatigue behavior, *International Journal of Fatigue*, 2016.