# Rôle de la microstructure polycristalline à différentes échelles sur les premiers stades d'endommagement en fatigue: expériences et simulations en plasticité cristalline

Loïc Signor, Patrick Villechaise

Avec la contribution de:

Mikael GUEGUEN (IR CNRS), Jean DUMONCEL (IE), Emmanuel LACOSTE (post-doc), Thomas GHIDOSSI, Van Truong DANG, Julien GENEE (doctorants), Samuel HEMERY (MCF)



 Institut Pprime - UPR 3346 CNRS (INSIS, s9 et 10 et INP, s5

 Université de Poitiers (UFR SFA, ENSIP)

 ISAE-ENSMA
 CNU 26, 28, 30, 60, 61, 62, 63, 74

# Plan de l'exposé

Premiers stades d'endommagement en fatigue au sein des alliages métalliques polycristallins : généralités, motivations

Calculs d'agrégats polycristallins par éléments-finis (EF) en fatigue : outils, méthodologies, verrous

Exemples d'études :

- aciers inoxydables austénitiques de type 316L(N)
- alliages de Titane TA6V



# Plan de l'exposé

Premiers stades d'endommagement en fatigue au sein des alliages métalliques polycristallins : généralités, motivations

Calculs d'agrégats polycristallins par éléments-finis (EF) en fatigue : outils, méthodologies, verrous

Exemples d'études :

- aciers inoxydables austénitiques de type 316L(N)
- alliages de Titane TA6V



# Généralités: différents stades de fatigue

Cas des alliages sans défaut interne (porosité, inclusion...)



Etude de l'activation et du développement de la micro-plasticité à l'échelle du grain au sein d'un agrégat polycristallin



# Généralités : mécanismes de formation des fissures

Cas 'école' des monocristaux de Cuivre (CFC):

Formation de Bandes de Glissements Persistantes (BGP)

Amorçage par formation d'extrusions/intrusions



[Ma et Laird, 1989]



[Mughrabi et al., 1981]

Critère d'amorçage: hauteur d'extrusion critique?

Morphologie des extrusions/intrusions par AFM

[Sabatier, Villechaise, Girard]

<u>Cf. exposé Maxime Sauzay</u>





# Généralités – Position de l'étude

De nombreux paramètres influents

- Chargement mécanique:
  - <u>simple : traction, traction/compression</u>
  - complexe (multiaxial, variable...)
  - influence du niveau moyen, de la forme du cycle, du rapport R, de la fréquence.... pas ou peu étudié





# Généralités: Echelle pertinente vs. Approches théoriques/numériques





# **Motivations & Démarche**

#### Expériences

Essais mécaniques monotones et cycliques

Modes de déformation et d'endommagement Observation MEB (traces glissement, fissures)

#### Caractérisation microstructurale

Cartes EBSD d'orientation cristalline



#### Simulations numériques (EF) Approche de type plasticité cristalline



Analyse/Post-traitement - critères/indicateurs d'amorçage

Différents alliages (titanes, aciers inox., superalliages base Ni) : matériaux industriels et/ou modèles

But: comprendre les mécanismes et identifier les configurations cristallographiques locales critiques

- → pistes d'optimisation des matériaux
- $\rightarrow$  définition d'indicateurs d'amorçage par fatigue  $\rightarrow$  étape suivante : outils prédictifs?



# Plan de l'exposé

Premiers stades d'endommagement en fatigue au sein des alliages métalliques polycristallins : généralités, motivations

Calculs d'agrégats polycristallins par éléments-finis (EF) en fatigue : outils, méthodologies, verrous

Exemples d'études :

- aciers inoxydables austénitiques de type 316L(N)
- alliages de Titane TA6V



# Génération/Reconstruction et maillage d'agrégats 3D

Caractérisation expérimentale 3D de la microstructure cristalline



EBSD + Serial sectionning (FIB, polishing, laser ablation) = destructive

Ghosh et al., 2008]



X-ray DCT (diffraction contrast tomography)

[King et al., 2010]

Modèles et algorithmes de génération de microstructures



Voronoï, Laguerre-Voronoï, Johnson-Mehl...

Approches « mixtes » Cartes EBSD = faces contraintes

[St-Pierre et al., 2008]

Un verrou: description des joints de grains et maillage

Approche 'CAO' (surfaces NURBS) [Ghosh, 2008],

Approche par 'marching-cubes' [Dream3D]



# Génération/Reconstruction et maillage d'agrégats 3D

Des logiciels:

- Neper : Voronoï et 'dérivés', maillage optimisé [Quey et al., 2011]
- Dream3D : analyse/contrôle des caractéristiques microstructurales [Groeber et al., 2008]

Développement d'un code interne S2M-3D (python) Contributeurs principaux: Mikaël Gueguen (IR), Loïc Signor



### Loi de comportement : élasto-visco-plasticité cristalline





- cubic elasticity (anisotropic)
- 12 slip systems {111}<110>
  - slip plane normal  $\underline{n}^{\alpha}$
  - slip direction

α	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Schmid & Boas notation	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
slip plane	(111)			(111)			(111)			(111)		
slip direction	[011]	[101]	[110]	[011]	[101]	[110]	[011]	[101]	[110]	[011]	[101]	[110]

Plastic strain rate

 $\dot{\mathcal{E}}^{I}$ 

INSTITUT

$$\dot{\gamma} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} (\underline{s}^{\alpha} \otimes \underline{n}^{\alpha})_{s}$$

Resolved shear stress (Schmid law)

 $\underline{s}^{\alpha}$ 

$$\tau^{\alpha} = \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{s}^{\alpha} \otimes \underline{n}^{\alpha})_{s}$$



# Loi de comportement : élasto-visco-plasticité cristalline

- Domaine d'élasticité :  $\tau^{\alpha} < \tau_{c}^{\ \alpha}$   $\alpha = 1...12$
- Loi d'écoulement :  $\dot{\gamma}^{\alpha} = f(\tau^{\alpha}; \text{var.int...})$

phénoménologique  
p. ex. [Meric & Cailletaud, 1991]  
$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \left\langle \frac{\left| \tau^{\alpha} - x^{\alpha} \right| - \tau_{c}^{\alpha}}{k} \right\rangle^{n} signe(\tau^{\alpha} - x^{\alpha})$$

basée sur densité de dislocations [Tabourot et al. 1997]

- 2 grands verrous :

identification des paramètres (difficultés des essais sur monocristaux) en 1er lieu: constantes d'élasticité et cission critique

# Difficultés numériques

- Nombre de variables internes important
- Taille des agrégats, nombre d'agrégats (notion de VER en fatigue?)
- Quantité de données à analyser / post-traiter
- Accès à un nombre de cycles significatif ?



Colloque national MECAMAT Aussois 2017, 23-27 janvier 2017 13

**localisation** en bande de glissement persistante

cf. exposé Maxime

# Plan de l'exposé

Premiers stades d'endommagement en fatigue au sein des alliages métalliques polycristallins : généralités, motivations

Calculs d'agrégats polycristallins par éléments-finis (EF) en fatigue : outils, méthodologies, verrous

#### Exemples d'études :

- aciers inoxydables austénitiques de type 316L(N)
- alliages de Titane TA6V



### Exemple 1: Acier inoxydable austénitique 316LN



Travaux réalisés dans le cadre du Programme ANR AFGRAP

(Amorçage d'une fissure de Fatigue dans un Grain d'Agrégat polycristallin et Propagation dans les grains adjacents)

EdF (pilote), Areva, CEA, Centre des Matériaux, LMSSMat, SiMaP, SYMME, Institut Pprime



# Analyse des fissures amorcées en surface (région ~1000 grains)

Différents modes d'amorçage en compétition [Mineur et\_al., 2002]



143 fissures détectées (110 fissures / mm<sup>2</sup>)

Amorçage le long de BGP prépondérant et conduisant à la fissure fatale dans les conditions étudiées

Analyse des conditions d'amorçage des fissures transgranulaires

- taille de grain
- orientation du système de glissement activé

(analyse des traces de glissement par MEB/EBSD)



#### Analyse des fissures amorcées en surface (région ~1000 grains)



Taille de grain

Orientation cristalline / axe de sollicitation

Influence notable de la taille de grain (amorçage dans gros grains) Pas ou peu d'influence du facteur de Schmid

... mais aucun critère!



[Signor et al., 2016]

# Analyse des fissures amorcées en surface (région ~1000 grains)



Domaines favorisant l'amorçage  $\lambda \in [30-50^\circ]$   $\beta \in [50-70^\circ]$ 

Inclinaison de la bande / surface : capacité à induire un relief

#### ... mais aucun critère!

Statistiques cohérentes avec travaux passés (à part facteur de Schmid) [Mineur et al., mat. sci. eng. A, 2000] ; [Mu et al., mat. sci. eng. A, 2013]

[Signor et al., 2016]





**INSTITU** 

[Signor et al., 2016], Travaux T. Ghidossi

#### Simulations: maillage et conditions aux limites







#### Simulations: Loi de comportement

Flow rule

Isotropic hardening

$$\dot{\gamma}^{s} = \dot{\gamma}_{0} \left\langle \frac{\left| \tau^{s} \right|}{\tau_{c}^{s}} \right\rangle^{n} signe(\tau^{s} - x^{s})$$
$$\tau_{c}^{s} = \tau_{0} + \mu b \sqrt{\sum_{u} h^{su} \rho^{u}}$$
$$\dot{\rho}^{s} = \frac{1}{b} \left( \frac{1}{K} \sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^{u}} + \frac{1}{D} - g_{c} \rho^{s} \right) \dot{\gamma}^{s}$$

#### Implemented in Abaqus - UMAT FORTRAN Subroutine

Developped by LMSSMat UMR 8579 Ecole Centrale Paris (France) Kindly provided in the framework of the AFGRAP project benchmark

C11	C12		C44	$a_0$	a <sub>1</sub>		a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	$\dot{\gamma}_0$		п	
198 000	125 (	000	122 000	0.02	0.08		0.18	0.3 4e-1		1	73	
MPa	MPa		MPa	-	-		-	-	s <sup>-1</sup>		-	
$g_{c}$		K		D		$ au_{0}$		$ ho_{_0}$		b		
3.86e-6		42		1000		25.46		1770000		2.54e-7		
mm		-		mm		MPa		mm <sup>-2</sup>		mm		



[J. Schwartz, O. Fandeur and C. Rey, 2012]

Contraintes et déformations moyennes dans l'agrégat et par grain





intra-grain et inter-grain heterogeneity

multiaxial local stress state

Contraintes et déformations moyennes dans l'agrégat et par grain





"small aggregate" seems to be sufficient to predict macroscopic behaviour & grains average

Glissement plastique en surface

système de glissement primaire C1 (µ=0.5)dans le grain central



- Activation of slip system C1 is predicted in the vicinity of crack initiation
- Crack position does not correspond to maximum slip region

Influence of the size of the aggregate

- similar slip distributions are predicted in the two cases
- but few differences are observed (effect of non-direct neighbours & BC)



0 000

#### Glissement plastique en surface (12 systèmes de glissement)



Pertinence du glissement plastique cumulé / système comme 'indicateur' de fatigue
 Importance de la description réelle 3D de l'agrégat polycristallin



Indicateur d'extrusion/intrusion:  $\gamma^p$  projeté suivant la normale à la surface



Glissement projeté x distance joint-surface

--> Glissement projeté pondéré maximal pour le grain fissuré uniquement

#### Lien avec la hauteur d'extrusion critique?



Résultats Centre des Matériaux – Mines Paristech

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

#### Effet de voisinage: morphologie 3D et cristallographie sous la surface



Effet de voisinage: morphologie 3D et cristallographie sous la surface Average plastic slip in central grain (for 10 different realizations) Aggregate 2:



- Iarge influence of neighbour grains on average slip (>100%)
- grains interaction effect is stonger for the small grain
- higher slip activity if observed in the large grain



# Plan de l'exposé

Premiers stades d'endommagement en fatigue au sein des alliages métalliques polycristallins : généralités, motivations

Calculs d'agrégats polycristallins par éléments-finis (EF) en fatigue : outils, méthodologies, verrous

#### Exemples d'études :

- aciers inoxydables austénitiques de type 316L(N)
- alliages de Titane TA6V



Alliage bi-phasé  $\alpha/\beta$ ; microstructure bimodale (duplex)





Phase  $\alpha$  HCP: Systèmes de glissement & Anisotropie élastique



Phase  $\alpha$  HCP: Systèmes de glissement & Anisotropie élastique



32

Phase  $\alpha$  HCP: Systèmes de glissement & Anisotropie élastique





Cracks within prismatic planes for very high Schmid factor :  $\mu_{prism} > 0,47$ 



[Bridier et al.., 2008]



Colloque national MECAMAT Aussois 2017, 23-27 janvier 2017 <sup>34</sup>

INSTITUT





[Bridier et al.., 2008]



Colloque national MECAMAT Aussois 2017, 23-27 janvier 2017 <sup>36</sup>

Réduction des durées de vie associée à la présence de macrozones



Principales questions

- compétition entre le glissement basal et prismatique (contraintes locales vs. cissions critiques)
- domaine d'orientation favorisant le glissement et l'amorçage basal
- rôle des macrozones sur l'activation du glissement et l'amorçage



[Bridier et al.., 2008]

Essai de traction monotone in-situ sous MEB





Thèse Van Truong Dang (2016) dirigée par Patrick Villechaise et Loïc Signor Essai in-situ réalisé avec la contribution de Samuel Hemery

Essai de traction monotone in-situ sous MEB





Thèse Van Truong Dang (2016) dirigée par Patrick Villechaise et Loïc Signor Essai in-situ réalisé avec la contribution de Samuel Hemery

Essai de traction monotone in-situ sous MEB





Thèse Van Truong Dang (2016) dirigée par Patrick Villechaise et Loïc Signor Essai in-situ réalisé avec la contribution de Samuel Hemery

Essai de traction monotone in-situ sous MEB

Caractérisation de l'activation :

**Glissement basal** 

**Glissement prismatique** 

Zone 2-

\$\$\$\$\$\$\$\$



Estimation des contraintes locales ? Évaluation statistique par simulation EF



Thèse Van Truong Dang (2016) dirigée par Patrick Villechaise et Loïc Signor Essai in-situ réalisé avec la contribution de Samuel Hemerv

# Simulations: Evaluation statistique des champs élastiques

Hypothèses simplificatrices: morphologies, phase α nodulaire uniquement Réalisation 1 Grain central d'orientation constante



Stratégies similaires:

CFC en élasticité cristalline [Sauzay, 2006], HC en élasto-plasticité monotone [Priser, 2011]



Thèse Van Truong Dang (2016) dirigée par Patrick Villechaise et Loïc Signor

# Simulations: Evaluation statistique de champs élastiques

Moyenne spatiale et écart-type d'un champ X dans un domaine V

$$\langle X \rangle_{V} = \frac{1}{V} \int_{V} \vec{X(x)} dv$$
  $SD_{V}(X) = \sqrt{\frac{1}{V} \int_{V} (\vec{X(x)} - \langle X \rangle_{V})^{2}} dv$ 

Origine de la dispersion: intra-réalisation vs. inter-réalisation



intra-réalisation:

$$SD_{V}^{\text{intra}}\left(X\right) = \sqrt{\frac{1}{V}\sum_{k=1}^{N} \left(SD_{V_{k}}\right)^{2} V_{k}}$$

→ moyenne des dispersions de chaque réalisation

inter-réalisation:

$$SD_{V}^{\text{inter}}(X) = \sqrt{\frac{1}{V}\sum_{k=1}^{N} \left(\left\langle X \right\rangle_{V_{k}} - \left\langle X \right\rangle_{V}\right)^{2} V_{k}}$$

→ dispersion des moyennes de chaque réalisation



Thèse Van Truong Dang (2016) dirigée par Patrick Villechaise et Loïc Signor 43 Collogue national MECAMAT Aussois 2017, 23-27 janvier 2017

# Conditions aux limites, comportement, agrégats

Conditions aux limites : état de contrainte macroscopique uniaxial / x





> Elasticité cristalline Ti  $\alpha$  (isotropie transverse) :

 $C_{11} = 162.4$   $C_{33} = 180.7$   $C_{44} = 46.7$   $C_{12} = 92$   $C_{13} = 69$  (GPa) [Fisher 1964]

Morphologie des grains: octaèdres tronqués





- ✓ état de contrainte macroscopique uniaxial
- ✓ hétérogénéité des contraintes: écart-type relatif ~ 6 %



macroscopique

✓ contrainte axiale différente de la contrainte

✓ état de contrainte multiaxial (faiblement)

# Résultats pour une orientation spécifique

#### Facteur de Schmid effectif





#### Influence du nombre de réalisations 10<sup>0</sup> $\epsilon_{rela}(<\!\!\sigma_{11}\!>_V\!\!)$ $egin{aligned} \epsilon_{rela}(SD_V\!(\sigma_{11})) \ \epsilon_{rela}(<\!\sigma_{11}\!>_{V_g}) \end{aligned}$ 10-1 $\bullet \bullet \epsilon_{rela}(SD_{V_q}(\sigma_{11}))$ $\mathcal{E}_{rel}(A) = \frac{2SD_V(A)}{\langle A \rangle_{...} \sqrt{N}}$ 10<sup>-2</sup> 10<sup>-3</sup> 100 140 200 300 500 0 400

Nb de réalisations: N=140

$$\varepsilon_{rel}\left(\left\langle \sigma_{11}\right\rangle_{Vg}\right) = 2\%$$
  $\varepsilon_{rel}\left(SD_{Vg}\left(\sigma_{11}\right)\right) = 4\%$ 

Attention: résultats en élasticité cubique pour l'austénite (Emax/Emin ~ 3)





### Résultats sur agrégats non-texturés: facteur de Schmid effectif



Domaine d'orientation du glissement basal

Pas de différences entre [5] et [6] ? Pas cohérent avec les observations Explications: choix trop spécifique des

orientations, constantes d'élasticité?





# Résultats sur agrégats non-texturés: rôle des grains voisins

#### Réalisations « extrêmes » et analyse de voisinage

Grain central orienté [Bob]



9: voisin en profondeur1 et 3: voisins latéraux5 et 7: voisins axiaux







✓ Voisins axiaux: rigides

✓ Voisins axiaux: souples

- ✓ Voisins latéraux: souples
- $\checkmark$  Voisins en profondeur: souples

Tendances similaires à celles mentionnées par [Sauzay, 2006] et [Pommier, 2002]



### Résultats sur agrégats non-texturés: rôle des grains voisins

Réalisations « extrêmes » et analyse de voisinage et dans la vraie vie des polycristaux ?



### Résultats sur agrégats texturés: prise en compte des macrozones

Introduction « pragmatique » d'une échelle intermédiaire



### Résultats: Indicateur d'amorçage

Prise en compte de la contrainte normale sur les plans de glissement



### Résultats: Indicateur d'amorçage

Prise en compte de la contrainte normale sur les plans de glissement



### Conclusions

Calculs d'agrégats polycristallins en fatigue: 2 stratégies complémentaires

- 1. Comparaison « la plus directe possible » entre
  - Champs simulés (agrégat 3D identifié expérimentalement)
  - Observations en surface

Vers des données plus quantitatives:

mesure de champs  $\epsilon_{tot}$  (DIC),  $\epsilon_{el}$  (HR-EBSD)

- Identification / validation: comportement local, indicateur d'amorçage
- 2. Evaluation statistique des champs locaux (tirage)
  - Étude de l'influence de différents paramètres (microstructure, ...)
  - Prédiction des valeurs extrêmes

Identification des configurations pertinentes à étudier avec stratégie 1

- → Grandeurs à considérer ?
  - Locales, moyennes par grains, intermédiaires (volume d'une bande...)



# Merci de votre attention



#### Superalliages base Ni : Interactions bandes - joints

Arrêt des bandes de glissement au joints de grains et de macles et formation de 'micro-volumes'



Rotation cristalline le long d'un microvolume (EBSD)





à l'origine des 1<sup>ers</sup> endommagements



**ENSMA** 

Visite HCERES/1561222021600 Equipe Environmanage 20017, 23 227 publikiér 2017 58

#### Superalliages base Ni : Interactions bandes - joints



<u>هر</u>

INSTITUT





59