



**HAL**  
open science

## Effet de surface libre dans les agrégats polycristallins en fatigue à grand nombre de cycles.

Camille Robert, Anis Hor, Franck Morel, Nicolas Saintier, Thierry Palin-Luc

### ► To cite this version:

Camille Robert, Anis Hor, Franck Morel, Nicolas Saintier, Thierry Palin-Luc. Effet de surface libre dans les agrégats polycristallins en fatigue à grand nombre de cycles.. Congrès français de mécanique (21 ; 2013 ; Bordeaux (Gironde))., Aug 2013, France. pp.6. hal-00871351

**HAL Id: hal-00871351**

**<https://hal.science/hal-00871351>**

Submitted on 16 Oct 2013

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Effet de surface libre dans les agrégats polycristallins en fatigue à grand nombre de cycles

C. Robert<sup>a</sup>, A. Hor<sup>b</sup>, F. Morel<sup>a</sup>, N. Saintier<sup>b</sup>, T. Palin-Luc<sup>b</sup>

a. Arts et Métiers ParisTech, LAMPA, Angers

b. Arts et Métiers ParisTech, I2M, CNRS, Bordeaux

## Résumé :

*Une analyse du comportement en fatigue à grand nombre de cycles est conduite à travers la simulation numérique d'agrégats polycristallins. Plusieurs matériaux métalliques à structure cristalline cubique à face centrée mais de coefficients d'anisotropie élastique différents sont choisis. Plusieurs volumes élémentaires statistiques (VES), constitués d'un ensemble de 300 grains de texture isotrope et de géométrie équiaxe, sont sollicités au niveau de la limite de fatigue médiane macroscopique à  $10^7$  cycles. Trois modélisations sont étudiées : 2D avec déformation plane généralisée, 3D périodique et 3D avec surface libre. Plusieurs variables mésoscopiques (moyenne dans les grains) issues des simulations sont analysées en utilisant la statistique des valeurs extrêmes. Les résultats montrent un effet néfaste sur la tenue en fatigue des agrégats modélisés avec une surface libre si l'anisotropie élastique cristalline est suffisante.*

## Abstract :

*An analysis of high cycle fatigue behavior is done via the numerical simulation of polycrystalline aggregates. Different metallic materials with a FCC crystalline structure, but different cubic elastic coefficients, are investigated. Several statistical elementary volumes (SEV), consisting of 300 grains with isotropic texture and equiaxed geometries, are loaded at the median macroscopic fatigue limit for  $10^7$  cycles. Three different models are studied: 2D generalized plane strain, 3D periodic and 3D periodic with a free surface. Different mesoscopic variables are analyzed using extreme value statistics. The results show a detrimental effect on the fatigue strength of the modeled aggregates with a free surface, if the crystalline elastic anisotropy is sufficient.*

**Mots clefs :** fatigue à grand nombre de cycles ; surface libre ; anisotropie élastique

## 1 Introduction

Le recours à la simulation numérique d'agrégats polycristallins a permis, depuis les vingt dernières années [1], d'apporter un éclairage nouveau sur le lien entre les comportements mécaniques à l'échelle des grains et la réponse globale à l'échelle du volume élémentaire représentatif (VER). Même si les comportements mécaniques sous chargement monotone ont principalement été ceux abordés, des études dédiées au comportement en fatigue sont de plus en plus fréquentes [2]. Quel que soit le type de comportement étudié, la question de la représentativité de l'agrégat numérique utilisé pour la simulation se pose néanmoins toujours.

Afin de pallier la définition d'un VER au sens de la fatigue, plusieurs auteurs ont utilisés la notion de volume élémentaire statistique (VES) associé à la statistique des valeurs extrêmes. Par exemple, Liao [3] utilise la méthode de Monte Carlo pour former des VES de microstructure avec une distribution aléatoire de taille de grains et des orientations. Une bonne corrélation est alors constatée entre les résultats obtenus en modélisant la distribution des valeurs extrêmes par une distribution de Fréchet et les résultats expérimentaux pour un alliage d'aluminium 2024-T351. Récemment, Przybyla et al. [4, 5]

ont introduit un nouveau cadre en tenant compte des effets de voisinage à travers les valeurs extrêmes des fonctions de corrélation marquées [6] pour quantifier l'influence de la microstructure sur la limite de fatigue et la contribution des interactions des composants de la microstructure dans le cas d'un chargement uniaxial. Ces auteurs ont utilisé la distribution de Gumbel pour décrire la probabilité des valeurs extrêmes des réponses étudiées.

Cette étude s'appuie sur la théorie des valeurs extrêmes afin d'analyser l'influence d'une surface libre non rugueuse sur la tenue en fatigue à grand nombre de cycles. L'effet de l'anisotropie élastique est également abordé.

## 2 Modélisation

Une étude précédente [7] a montré le rôle majeur de l'élasticité cubique, en comparaison avec une modélisation utilisant en plus la plasticité cristalline, sur la réponse à l'échelle mésoscopique de plusieurs critères de fatigue à grand nombre de cycles dans le cas où la limite de fatigue est proche de la limite d'élasticité macroscopique. Cette étude se limitera donc à une modélisation du comportement des matériaux en élasticité linéaire.

L'anisotropie cubique est généralement caractérisée par un coefficient sans dimension défini par :

$$a = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (1)$$

Afin d'étudier l'effet de l'anisotropie élastique sur la réponse mésoscopique, trois matériaux sont étudiés, avec des coefficients différents : l'aluminium avec un comportement quasiment isotrope ( $a=1.22$ ), le cuivre avec une forte anisotropie ( $a=3.26$ ) et le nickel avec un coefficient d'anisotropie moyen ( $a=2.51$ ). Les propriétés élastiques sont récapitulées dans la table 1. Ces trois matériaux possèdent une structure cubique à face centrée (CFC). Chaque grain possède 12 systèmes de glissement de normale de type  $\{111\}$  et de direction de type  $\langle 110 \rangle$ .

	$C_{11}$ [GPa]	$C_{12}$ [GPa]	$C_{44}$ [GPa]	$a$
Al	107	60.8	28.3	1.22
Ni	246.5	147.3	124.7	2.51
Cu	170	124	75	3.26

TABLE 1 – Modules d'élasticité cubique et coefficient d'anisotropie pour les différents matériaux étudiés

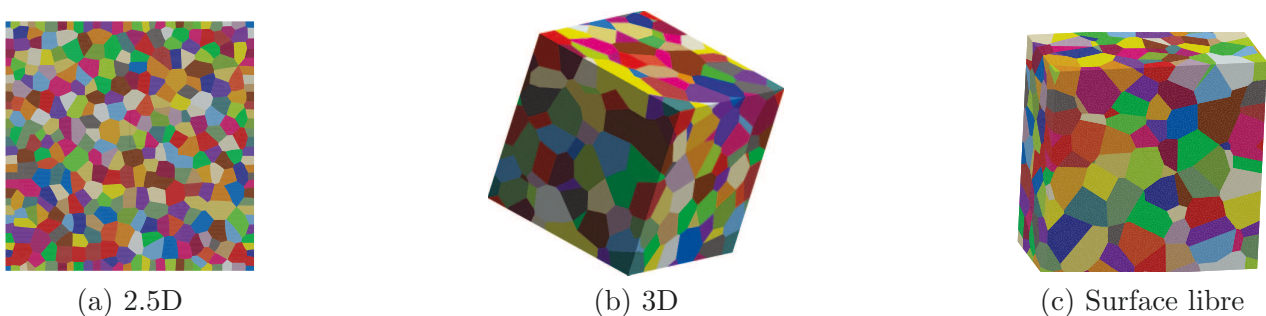


FIGURE 1 – 3 modélisations d'agrégats polycristallins étudiées : (a) 2D périodique avec hypothèse des déformations planes généralisées, (b) 3D entièrement périodique, (c) 3D semi-périodique avec surface libre

En terme 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 périodique, 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 maillage est associé à 8 jeux d'orientations de texture isotrope. Chaque jeux 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  $\times$  8 jeux d'orientations).

Les chargements appliqués sont de la traction et de la torsion, tous les deux purement alternés. Le chargement est appliqué macroscopiquement (contrainte moyenne dans l'agrégat) et son niveau correspond à la limite de fatigue médiane à  $10^7$  cycles. Le rapport entre la limite en torsion et celle en traction est supposée identique pour ces trois matériaux et à été identifiée expérimentalement dans les travaux de Lukás and Kunz [8]. Ce rapport est de 0,64. Les simulations sont réalisées avec le code de calcul par éléments finis ZeBuLoN [9], développé conjointement par le centre des matériaux de l'École des Mines ParisTech, Northwest Numerics et l'ONERA. Le solveur implicite est employé.

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.

Dans cette étude, le critère de Findley [10] 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 :

$$\max_s (\tau_{r,a}^s + \alpha \sigma_{n^s,max}) \leq \beta \quad (2)$$

où  $\tau_{r,a}^s$  est l'amplitude de la cission résolue sur le système de glissement  $s$ ,  $\sigma_{n^s,max}$  la contrainte normale maximale au cours du cycle sur le système  $s$ .  $\alpha$  et  $\beta$  sont deux paramètres qui dépendent des limites de fatigue en traction et en torsion.

Pour étudier ces grains critiques plusieurs approches statistiques sont possibles. Ce travail est basé 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.

### 3 Probabilité des valeurs extrêmes généralisées

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 :

$$Y_n = \max(X_1, X_2, \dots, X_n) \quad (3)$$

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

$$F_{Y_n}(x) \equiv P(Y_n \leq x) = P(X_1 \leq x, X_2 \leq x, \dots, X_n \leq x) \quad (4)$$

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 :

$$P\left(\frac{Y_n - b_n}{a_n} \leq x\right) = [F(a_n x + b_n)]^n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} G(x) \quad (5)$$

alors la fonction de répartition  $G$  est nécessairement de l'un des trois types suivants : Fréchet, Weibull ou Gumbel. Jenkinson [11] a proposé une seule et unique forme paramétrique (équation 6) appelée loi des valeurs extrêmes généralisée (GEV). Elle regroupe les trois lois limites précédentes et dépend d'un seul paramètre  $\xi$ . La fonction de répartition de cette loi est donnée par :

$$GEV : G_{\xi}(x) = \begin{cases} \exp\left(- (1 + \xi x)^{-\frac{1}{\xi}}\right) & \text{si } \xi \neq 0, \forall x / 1 + \xi x > 0 \\ \exp(-\exp(-x)) & \text{si } \xi = 0 \end{cases} \quad (6)$$

Le paramètre  $\xi$  est appelé indice extrême ou facteur de forme de la distribution. Son signe renseigne sur le type de la loi asymptotique du maximum : 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  $x = \frac{Y_n - b_n}{a_n}$  est appelée maximum normalisé de la VA  $X$ . Les paramètres  $a_n$  et  $b_n$  sont appelés facteurs d'échelle de la distribution.

## 4 Résultats et analyses

Les résultats sont analysés à partir des valeurs moyennées dans les grains. De plus, tous les grains des microstructures sont pris en compte, même dans le cas des microstructures avec une surface libre.

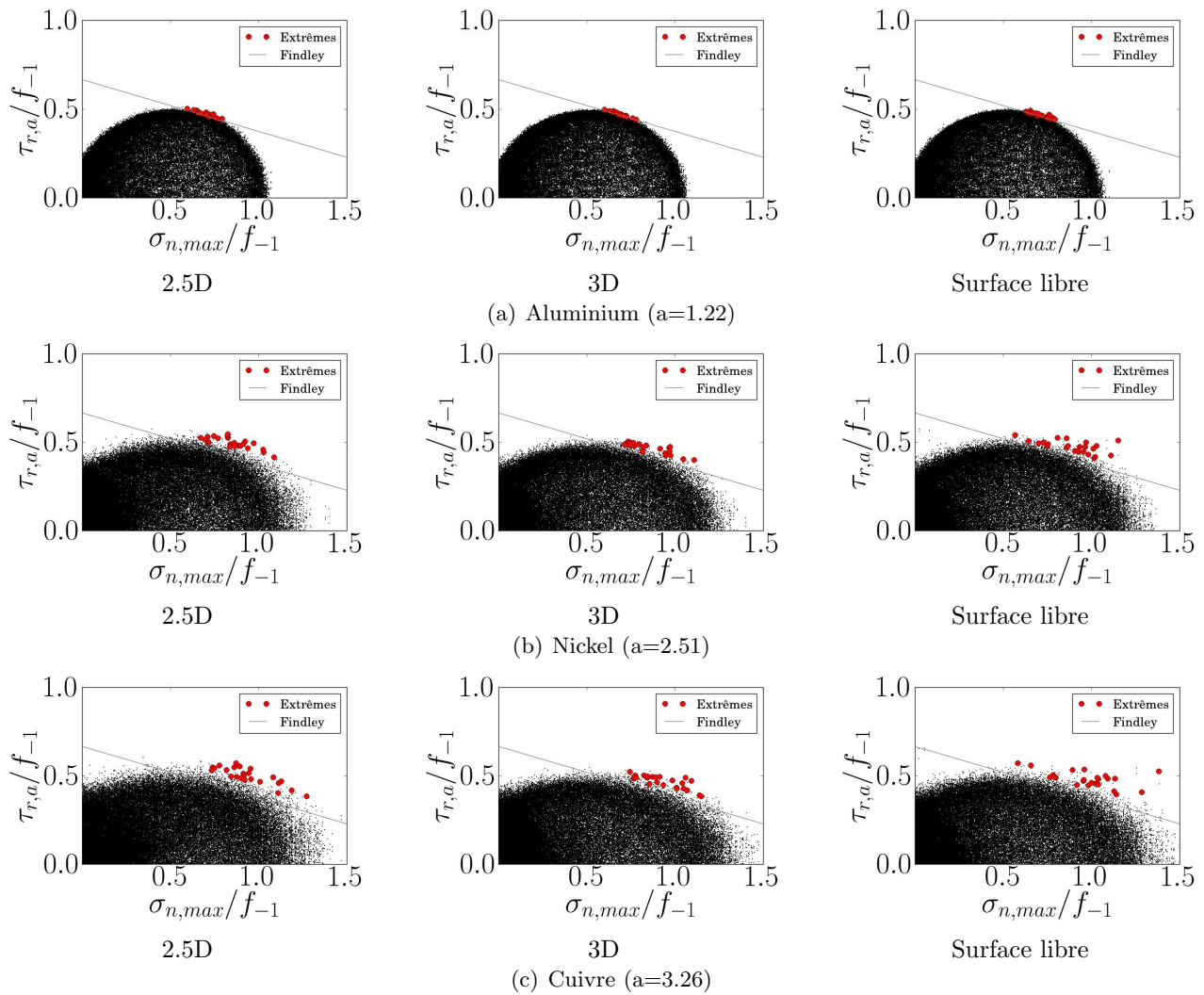


FIGURE 2 – Couple des variables  $\tau_{r,a}$  et  $\sigma_{n,max}$  (normalisées par la limite en fatigue en traction  $f_{-1}$ ) pour tous les systèmes de glissements dans le cas du chargement de traction alternée symétrique

La figure 2 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  $\times$  3 topologies de microstructures  $\times$  300 grains  $\times$  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) (voir figure 2).

La figure 3 montre 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.

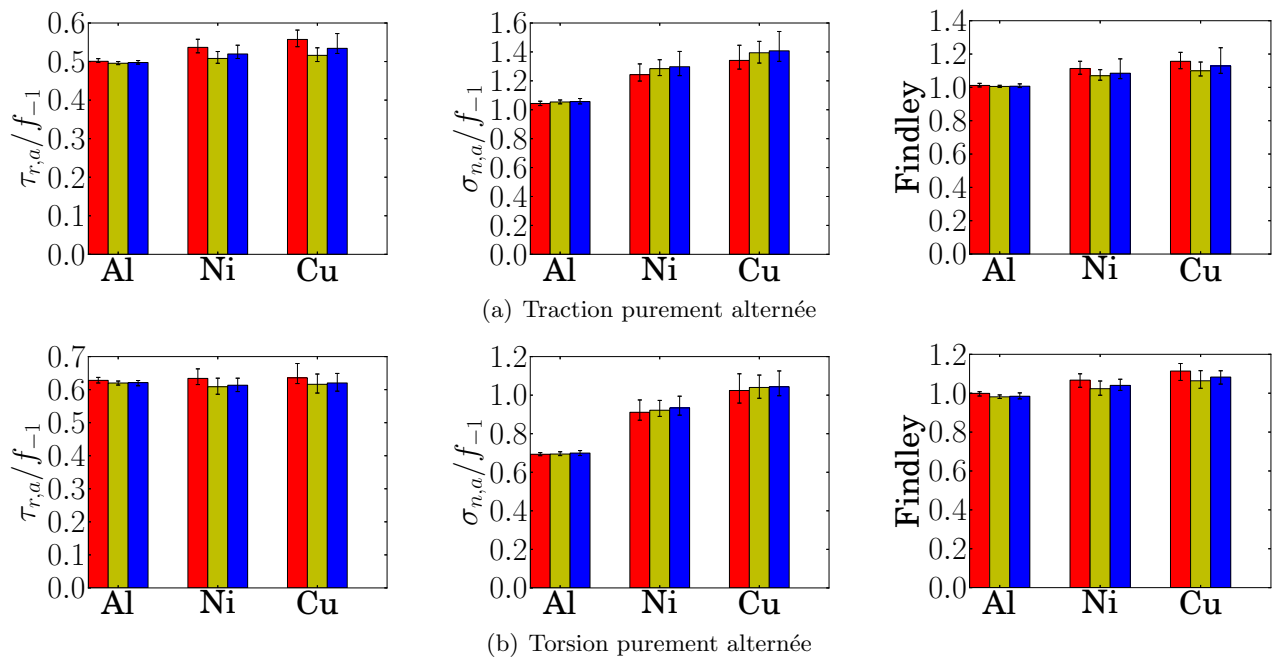


FIGURE 3 – Médianes des distributions des valeurs extrêmes pour l'amplitude de la cission résolue, la contrainte normale maximale ainsi que le coefficient de danger du critère de Findley. En rouge (barre à gauche) : modélisation en 2D, en jaune (barre au milieu) : 3D périodique et en bleu (barre à droite) : surface libre

Tous d'abord, pour les deux cas chargement ainsi que pour les trois modélisations, les valeurs médianes des distribution des trois paramètres étudiés (amplitude de cission résolue, contrainte normale maximale et le coefficient de danger du critère de Findley) augmentent avec le coefficient d'anisotropie cubique. Cependant 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. On peut aussi remarquer que l'écart est plus important entre un coefficient d'anisotropie de 1.22 (Aluminium) et de 2.51 (Nickel) qu'entre le nickel ( $a = 2.51$ ) et le cuivre ( $a = 3.26$ ).

Pour ce qui est de l'effet de la modélisation, les résultats ne montrent pas de différence sensible pour un matériau quasi-isotrope (l'aluminium). Dès que l'anisotropie est suffisante, l'hypothèse des déformations planes généralisée (calcul 2D) augmente la médiane des valeurs maximale de la cission résolue et du coefficient de danger du critère de Findley par rapport à une modélisation 3D (avec ou sans surface libre). La modélisation de la surface libre augmente également ces médianes en comparaison avec des simulations en 3D totalement périodique. Ceci peut s'expliquer car l'hypothèse des

déformations planes généralisées suppose une translation et une rotation globale de la microstructure suivant le troisième axe, et s'approche ainsi d'une modélisation 3D extrudée de faible épaisseur, donc d'une surface libre sur tous les grains. Les modélisations d'agrégats polycristallins avec une anisotropie élastique prenant en compte une surface libre prévoient une diminution de la limite de fatigue (coefficient de danger du critère de Findley plus élevé) en comparaison avec un volume élémentaire à cœur du matériaux (la modélisation en 3D périodique). Ces tendances sont observées expérimentalement où l'amorçage des fissures de fatigue apparaît souvent en surface des matériaux.

## 5 Conclusion

Une analyse de l'effet de l'anisotropie élastique sur une modélisation prenant en compte la surface libre a été proposée en s'appuyant sur des résultats de simulations numériques d'agrégats polycristallins et la statistique des valeurs extrêmes.

Une modélisation en 2D avec l'hypothèse des déformations planes généralisées a tendance à surestimer l'effet de surface libre en comparaison avec une modélisation comprenant quelque grains dans l'épaisseur. La prise en compte d'une surface libre, en comparaison avec un calcul 3D périodique a tendance à diminuer la limite de fatigue médiane prévue par le critère de Findley à l'échelle mésoscopique si l'anisotropie élastique est suffisante. Cette variation est cependant faible.

## Références

- [1] L. Meric and G. Cailletaud. Single crystal modeling for structural calculations: Part 2—finite element implementation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 113(1):171–182, 1991.
- [2] F. Bridier, D.L. McDowell, P. Villechaise, and J. Mendez. Crystal plasticity modeling of slip activity in Ti-6Al-4V under high cycle fatigue loading. *International Journal of Plasticity*, 25(6): 1066 – 1082, 2009.
- [3] M. Liao. Probabilistic modeling of fatigue related microstructural parameters in aluminum alloys. *Engineering Fracture Mechanics*, 76(5):668 – 680, 2009.
- [4] C. Przybyla, R. Prasannavenkatesan, N. Salajegheh, and D.L. McDowell. Microstructure-sensitive modeling of high cycle fatigue. *International Journal of Fatigue*, 32(3):512 – 525, 2010.
- [5] C. Przybyla and D.L. McDowell. Microstructure-sensitive extreme value probabilities for high cycle fatigue of Ni-base superalloy IN100. *International Journal of Plasticity*, 26(3):372 – 394, 2010.
- [6] R. Pyrz. Correlation of microstructure variability and local stress field in two-phase materials. *Materials Science and Engineering: A*, 177(1–2):253 – 259, 1994.
- [7] C. Robert, N. Saintier, T. Palin-Luc, and F. Morel. Micro-mechanical modelling of high cycle fatigue behaviour of metals under multiaxial loads. *Mechanics of Materials*, 55:112 – 129, 2012.
- [8] P. Lukás and L. Kunz. Effect of mean stress on cyclic stress-strain response and high cycle fatigue life. *International Journal of Fatigue*, 11(1):55 – 58, 1989.
- [9] J. Besson, R. LeRiche, R. Foerch, and G. Cailletaud. Object-oriented programming applied to the finite element method. *Revue Européenne des Eléments Finis*, 7:567 – 588, 1998.
- [10] W. Findley. A theory for the effect of mean stress on fatigue of metals under combined torsion and axial load or bending. *Journal of Engineering for Industry*, 81:301 – 306, 1959.
- [11] A. F. Jenkinson. The frequency distribution of the annual maximum (or minimum) values of meteorological elements. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 81(348):158 – 171, 1955.