



**HAL**  
open science

# Étude numérique de l'influence des propriétés microstructurales et de la rugosité de surface sur la localisation des champs mécaniques locaux dans les polycristaux

Yoann Guilhem, Stéphanie Basseville, Georges Cailletaud

► **To cite this version:**

Yoann Guilhem, Stéphanie Basseville, Georges Cailletaud. Étude numérique de l'influence des propriétés microstructurales et de la rugosité de surface sur la localisation des champs mécaniques locaux dans les polycristaux. 34ème Journées de Printemps, SF2M, May 2015, Paris, France. 6 p. hal-01580038

**HAL Id: hal-01580038**

**<https://hal.science/hal-01580038>**

Submitted on 1 Sep 2017

**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.

# Étude numérique de l'influence des propriétés microstructurales et de la rugosité de surface sur la localisation des champs mécaniques locaux dans les polycristaux

Yoann Guilhem<sup>1,a</sup>, Stéphanie Basseville<sup>2</sup> et Georges Cailletaud<sup>3</sup>

<sup>1</sup>LMT-Cachan/ENS-Cachan/CNRS/Université Paris-Saclay, 94235 Cachan, France

<sup>2</sup>LISV, Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines, 78000 Versailles, France

<sup>3</sup>MINES ParisTech, Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633, 91003 Evry Cedex, France

**Abstract.** Le phénomène de fatigue, dans le cas des alliages métalliques, peut conduire à l'apparition de fissures courtes en surface des composants industriels. L'évolution de ce type de fissures dans les polycristaux est grandement influencée par la microstructure locale, notamment l'orientation des grains et les joints de grains. Ce constat amène depuis quelques années à étudier le comportement de ces fissures à l'échelle mésoscopique (du grain à l'agrégat polycristallin) afin de quantifier l'effet des paramètres microstructuraux locaux. En parallèle, les procédés industriels induisent sur les pièces mécaniques un état de surface, caractérisé entre autres par une rugosité, un écrouissage local et des contraintes résiduelles. Chacun de ces paramètres influant sur la durée de vie en fatigue, il est utile de quantifier leur effet aux différentes échelles microstructurales au travers d'une analyse systématique pour chaque paramètre. Le travail présenté vise à caractériser l'influence de la rugosité, de manière isolée, sur la distribution des champs mécaniques locaux dans un polycristal. Il s'agit également de mettre en regard l'échelle de la rugosité avec celle de la microstructure, comme par exemple la taille de grain. Des calculs d'agrégats polycristallins, comportant différentes rugosités de surface, sont effectués avec un modèle de plasticité cristalline. L'analyse des résultats montre que la rugosité de surface perturbe les champs sur une couche critique, dont la profondeur est liée à la taille de grain.

## 1 Introduction

Les fissures courtes de fatigue s'initient et se propagent dans les alliages métalliques ont un comportement fortement lié à la microstructure du matériau. Elles s'initient généralement dans les zones de localisation de la déformation plastique, au sein des bandes de glissement persistantes qui débouchent en surface [1], avant de parvenir à se propager par au travers des grains offrant la configuration la plus favorable à leur évolution. Ce type de configurations se traduit en premier lieu par une orientation cristallographique du grain favorable aux déformations sur les systèmes de glissement du réseau cristallin, et par des joints de grains pour lesquels la désorientation cristalline ne freine pas la propagation de ces fissures. La multitude des configurations possibles (géométries des

---

<sup>a</sup> Corresponding author : yoann.guilhem@ens-cachan.fr

grains, orientations et désorientations cristallographiques) requiert une analyse statistique, qui peut se traduire soit expérimentalement par un nombre important d'observations microstructurales, soit numériquement par des simulations à l'échelle mésoscopique, comme des calculs d'agrégats polycristallins avec des modèles de plasticité cristalline [3] ou à une échelle inférieure, par dynamique des dislocations [4]. Les principaux résultats de ces études montrent qu'en surface, le paramètre prépondérant est l'orientation cristalline en regard du chargement, caractérisée par le facteur de Schmid. Interviennent ensuite la morphologie du grain et son voisinage.

L'effet d'un état de surface résultant d'un procédé industriel de finition de surface sur la durée de vie en fatigue d'une pièce fait intervenir de nombreux paramètres. Parmi eux, on peut noter la topologie de surface, la présence de contraintes résiduelles, l'écroissage de surface, la recristallisation ou transformation de phase. Selon le matériau, le type de finition et les sollicitations visées (modes et amplitude), cet effet peut être bénéfique ou néfaste, et à des degrés très variables [5]. C'est pourquoi il est important de caractériser correctement, d'une part, les chargements subis par une pièce et, d'autre part, l'effet du procédé de fabrication sur la durée de vie de la pièce. Plusieurs domaines de recherche entrent ici en jeu (métallurgie, chimie, mécanique) pour comprendre et modéliser les effets, souvent couplés, des paramètres de l'état de surface cités précédemment.

Compte tenu de ces constats, il est légitime de se demander si les résultats des simulations numériques réalisés sur des matériaux « vierges » mèneraient aux mêmes tendances et conclusions s'ils prenaient en compte l'état de surface industriel des pièces mécaniques. L'étude proposée vise à caractériser, de manière isolée et découplée, l'effet de la rugosité de surface sur les champs mécaniques locaux à l'échelle du grain et du polycristal en se basant sur des calculs d'agrégats à différentes tailles de grain et différentes rugosités de surface. Ceci constitue une base de résultats et de tendances, qui seront sans doute nuancés par la prise en compte des autres paramètres de l'état de surface tels que la présence de contraintes résiduelles.

## 2 Modèle numérique

### 2.1 Plasticité cristalline

Le comportement local des grains est régi par une loi de comportement de type monocristal [2], sous l'hypothèse des petites perturbations, décomposant de manière additive les déformations élastique et plastique. Le domaine élastique est caractérisé par une matrice d'élasticité anisotrope et la plasticité est basée sur la cission résolue  $\tau^s$ , calculée sur chaque système de glissement  $s$ , lui-même défini par une normale  $\mathbf{n}^s$  et une direction  $\mathbf{l}^s$ . La loi d'écoulement définit le glissement  $\gamma^s$  sur chaque système, par une fonction de type loi puissance, avec une cission critique  $\tau_c$ , et des termes d'écroissage non linéaires isotrope  $r^s$  et un terme d'écroissage cinématique  $x^s$ . La déformation plastique totale est la somme des contributions plastiques de l'ensemble des systèmes.

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

$$\boldsymbol{\tau}^s = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{m}^s \quad (2)$$

$$\dot{\gamma}^s = \text{sign}(\tau^s - x^s) \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - \tau_c - r^s}{K} \right\rangle n \quad (3)$$

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = \sum_s \dot{\gamma}^s \mathbf{m}^s \quad (4)$$

Le matériau faisant l'objet de l'étude est l'acier austénitique 316L, dont le réseau cristallin est de type cubique à faces centrées, pour lequel l'élasticité est à symétrie cubique et les systèmes de glissement sont octaédriques, au nombre de 12, définis par les plans de normale  $\{111\}$  et les directions  $(110)$ . L'identification des paramètres matériaux a été réalisée dans une étude précédente [6]. Une orientation cristallographique, définie de manière aléatoire, est attribuée à chaque groupe d'éléments définissant ainsi un grain. Le champ de déplacement est continu aux joints de grains, ce qui représente une modélisation très simplifiée de ces interfaces.

### 2.2 Maillage

Les microstructures synthétiques des agrégats polycristallins sont générées par décomposition de Voronoï. Plusieurs maillages, de dimensions (250  $\mu\text{m}$  x 250  $\mu\text{m}$  x 125  $\mu\text{m}$ ) et taille de maille identiques, ont été réalisés avec différentes tailles de grain. Leurs paramètres sont listés en Tableau 1 et un exemple de maillage est présenté en Figure 1(a).

**Tableau 1.** Paramètres microstructuraux des différents agrégats.

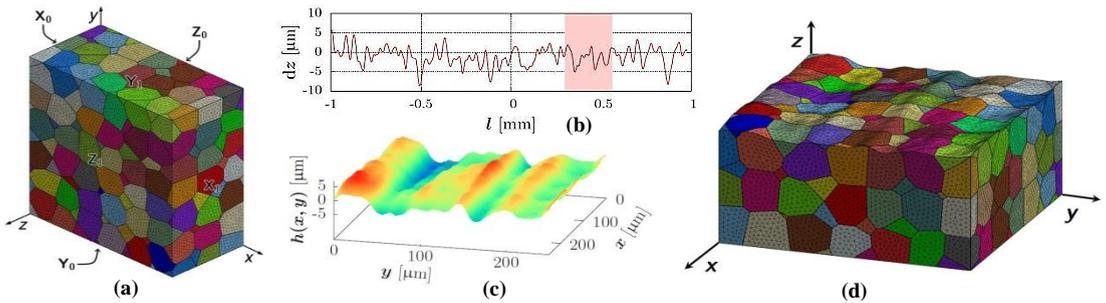
Nom	Nombre de grains	Taille de grain moy.	Nombre de nœuds	Nombre d'éléments
pad-85	85	87 $\mu\text{m}$	609 220	440 917
pad-291	291	51 $\mu\text{m}$	626 899	454 673
pad-1000	1000	36 $\mu\text{m}$	607 369	439 884

### 2.3 Rugosité de surface

Chacun de ces agrégats comporte une surface libre  $Z_1$  plate et sont donc considérés comme référence. Une surface de rugosité définie a été reproduite à partir d'un profil de rugosité réalisé sur un échantillon d'acier 304L avec un état de surface brossé, dont les caractéristiques sont décrites dans le Tableau 2. On retrouve la rugosité totale  $R_t$ , l'écart moyen arithmétique  $R_a$  et l'écart moyen quadratique  $R_q$ , qui reflète le rayon de courbure moyen des singularités géométriques de surface. La méthode consiste en une extension du profil en une surface qui est ensuite bruitée pour obtenir un relief caractérisé principalement par des stries dans la direction  $x$ . Les maillages d'agrégats rugueux utilisés dans la suite sont obtenus en appliquant cette rugosité sur les maillages de référence. La position initiale sur l'axe  $z$  de chaque nœud est déplacée proportionnellement à sa distance à la surface libre. En appliquant un coefficient  $k_r$  sur cette rugosité, on peut ainsi faire varier l'intensité de la rugosité, i.e. son rayon de courbure moyen. Pour chaque agrégat plat de référence, un agrégat rugueux a été généré pour  $k_r = \{0,1 ; 0,2 ; 0,3 ; 0,5 ; 1\}$ . La forme et le nombre de grains, ainsi que les orientations cristallines restent identiques d'un agrégat de référence à un agrégat rugueux, seule la position des nœuds est modifiée.

**Tableau 2.** Paramètres de rugosité du profil de l'état de surface brossé.

Paramètre	$R_t$	$R_a$	$R_q$
Valeur	14,30 $\mu\text{m}$	1,88 $\mu\text{m}$	2,38 $\mu\text{m}$



**Figure 1.** (a) Maillage pad-291 de référence. (b) Profil de rugosité brossé, la partie en surbrillance est utilisée pour générer la (c) surface de rugosité. (d) Maillage rugueux pad-291 pour  $k_r=1$ .

### 2.3 Chargement et conditions aux limites

Dans l'ensemble des calculs, la surface  $Z_1$  (cf. Figure 1), est libre d'efforts. Des conditions de type symétrie sont appliquées sur les faces  $X_0, Y_0$  et  $Z_0$ . Une condition de type MPC, contraint la face  $X_1$  à rester plane au cours du chargement. Un déplacement cyclique homogène est imposé sur la face  $Y_1$ ,

imposant une déformation globale de  $\Delta\varepsilon_{yy}/2=0.2\%$  pour un chargement étendu sur 2 cycles. L'axe de sollicitation est orthogonal à l'orientation des stries afin de se placer, *a priori*, dans la configuration la plus néfaste. D'autres chargements ont été testés (uniaxial suivant l'axe  $x$  ou équibiaxial), mais seront très peu développés ici.

### 2.4 Variables et indicateurs

L'étude porte sur les distributions des variables comme la déformation plastique cumulée sur l'ensemble des systèmes de glissement, notée  $\sum\gamma_{cum}$ , la contrainte équivalente de von Mises, notée  $\sigma_{mises}$ , ainsi que le nombre de systèmes actifs. La majeure partie des résultats présentés ici porteront sur la déformation plastique cumulée.

Afin de caractériser l'effet de la rugosité sur les champs mécaniques locaux, il est nécessaire d'introduire plusieurs indicateurs, définis pour une variable générique  $X$ . Ils sont basés sur les valeurs d'une variable en un point d'intégration d'un agrégat rugueux, notée  $X(k_r)$ , et de l'agrégat plat  $X_{ref}$ , choisie comme valeur de référence :

- Le rapport  $R(X, k_r) = X(k_r) / X_{ref}$ , défini en chaque point d'intégration ;
- L'indicateur  $IRPI(X, k_r)$ , de l'anglais « Induced Roughness Perturbation Indicator », qui correspond à la moyenne sur l'agrégat de l'écart absolu relatif entre le champ d'un agrégat rugueux et de son agrégat de référence :

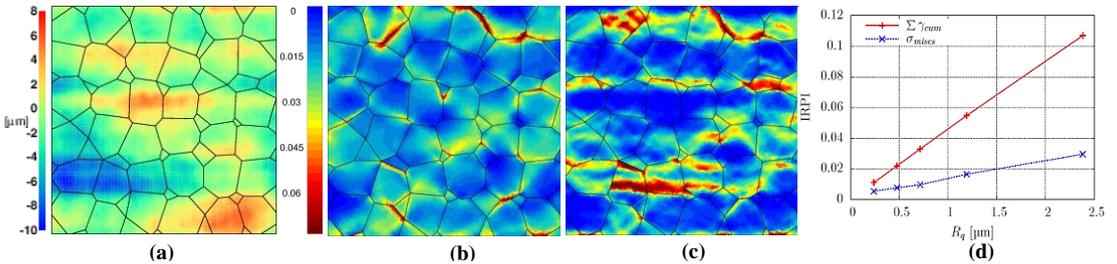
$$IRPI(X, k_r) = \frac{1}{N_{IP}} \sum_{IP} \left( \frac{|X(k_r) - X_{ref}|}{X_{ref}} \right) \tag{5}$$

## 3 Résultats et discussions

L'ensemble des premiers résultats portent sur l'agrégat pad-291, et sont donc à mettre en relation avec une taille de grain, notée  $D_g$ , de l'ordre de 51  $\mu m$ . L'effet de la taille de grain sera ensuite étudié en prenant en compte les autres agrégats avec des tailles de grains plus ou moins importantes.

### 3.1 Etude des champs locaux en surface

Les distributions de déformation plastique cumulée en surface libre de l'agrégat dans sa configuration plate et rugueuse ( $k_r=1$ ) sont présentées avec la carte de relief en Figure 2. On observe que les motifs de localisations en configuration de référence (bandes de localisations à 45°, points triples, joints de grains) sont remplacés par des zones de localisation qui suivent principalement les creux du relief, comme par un effet d'entaille. Les discontinuités du champ dues à la cristallographie restent néanmoins toujours présentes.



**Figure 2.** (a) Carte de relief de la surface rugueuse. Isoleviers de la déformation plastique cumulée en surface de l'agrégat pad-291 (b) plat et (c) rugueux avec  $k_r=1$ . (d) Evolution de l'IRPI en fonction des paramètres  $k_r$  et  $R_q$ .

En diminuant l'intensité de la rugosité par le paramètre  $k_r$ , la perturbation du champ de déformation plastique s'estompe peu à peu. Le Tableau 1 montre l'évolution (linéaire) de l'IRPI en fonction du paramètre  $k_r$ . Ceci met en lumière la compétition entre le rôle de la microstructure, par l'intermédiaire de l'orientation cristalline des grains, et de la rugosité de surface dans le processus de

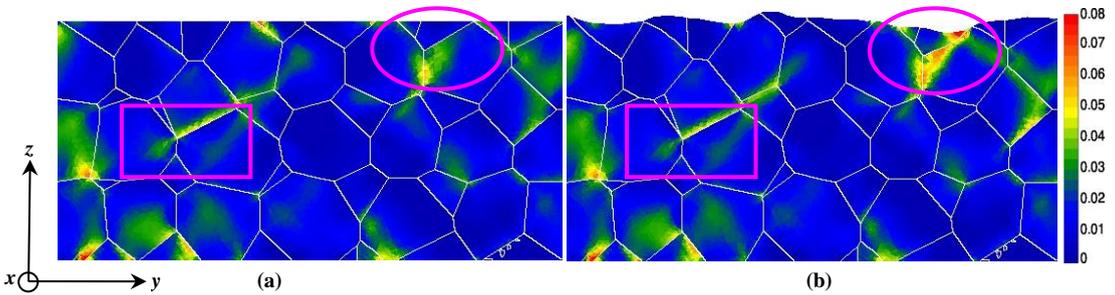
localisation de la déformation plastique à l'échelle des grains. Il a également été observé, sur la base d'autres calculs en sollicitant le même agrégat dans la direction  $x$ , parallèlement aux stries, que cette compétition laissait davantage place à la cristallographie. L'orientation du chargement vis-à-vis des stries entre donc également en jeu.

**Tableau 3.** Valeurs de  $IRPI(\sum\gamma_{cum})$  et  $IRPI(\sigma_{mises})$  en fonction des paramètres  $k_r$  et  $R_q$  pour l'agrégat pad-291.

$k_r$	0,1	0,2	0,3	0,5	1,0
$R_q$ ( $\mu\text{m}$ )	0,24	0,48	0,71	1,19	2,38
$IRPI(\sum\gamma_{cum})$	$1,09 \cdot 10^{-2}$	$2,19 \cdot 10^{-2}$	$3,29 \cdot 10^{-2}$	$5,49 \cdot 10^{-2}$	$1,07 \cdot 10^{-3}$
$IRPI(\sigma_{mises})$	$5,34 \cdot 10^{-3}$	$7,62 \cdot 10^{-3}$	$9,61 \cdot 10^{-3}$	$1,64 \cdot 10^{-2}$	$2,95 \cdot 10^{-2}$

### 3.1 Etude des champs locaux en volume

Les mêmes champs sont cette fois représentés à l'intérieur du polycristal, via des coupes réalisées dans le plan  $x=125 \mu\text{m}$  (cf. Figure 3). On remarque cette fois que la perturbation induite par la rugosité ne se limite pas à la surface mais se propage dans la première couche de grain (zones entourées), au-delà de laquelle, les écarts entre le champ « plat » et « rugueux » deviennent limités (zones encadrées). On peut donc supposer que, suivant le niveau de rugosité de surface, il existe une distance critique délimitant la zone perturbée.



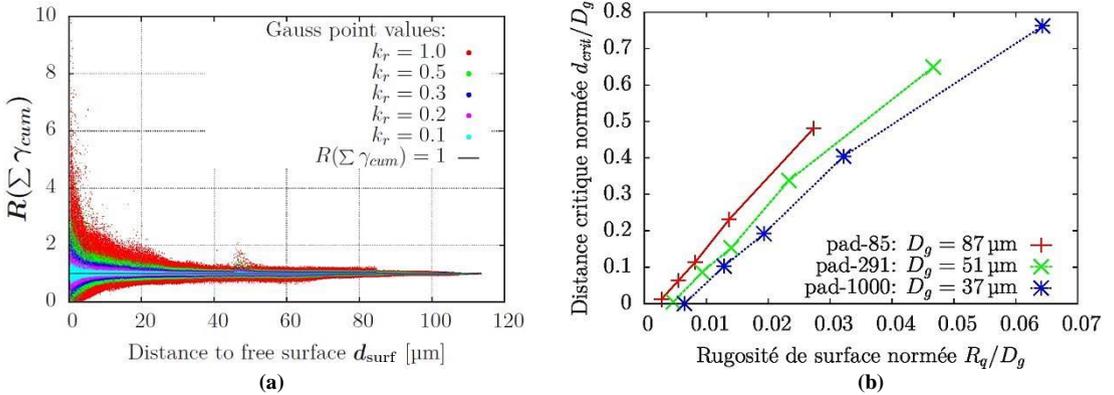
**Figure 3.** Coupes suivant le plan  $x=125 \mu\text{m}$  représentant les isovalues de déformation plastique cumulée dans l'agrégat pad-291 (a) plat et (b) rugueux avec  $k_r=1$ .

### 3.3 Analyse statistique

Il convient de mesurer cette distance critique, notée  $d_{crit}$ , sur la base des distributions des rapports  $R(\sum\gamma_{cum}, k_r)$  pour les différentes intensités de rugosité  $k_r$ . La Figure 4(a) présente ces valeurs en chaque point d'intégration en fonction de la distance à la surface libre  $d_{surf}$ . On remarque une dispersion autour de la droite d'ordonnée 1, correspondant à la valeur moyenne de la distribution, qui s'estompe progressivement lorsque  $d_{surf}$  augmente. On considère que la zone non perturbée est caractérisée par un écart-type inférieur à 0,1, ce qui implique qu'environ 99,7% des valeurs se placent dans un intervalle  $[0,995 ; 1,005]$ . Sur la base de ce critère, la distance  $d_{crit}$  est définie à différentes valeurs de  $k_r$ , auxquelles correspond un écart moyen quadratique  $R_q$ . L'évolution de cette distance critique en fonction de la rugosité, représentée en Figure 4(b), semble linéaire.

Cette procédure a été répétée sur les maillages pad-85 et pad-1000 afin de mettre la distance critique mesurée en regard de la taille de grain. La pente de la droite d'évolution apparente augmente avec la taille de grain, donc plus la taille de grain est importante, plus la zone perturbée par la rugosité de surface est profonde. On peut considérer que les barrières microstructurales que représentent les joints de grains font également barrage aux perturbations induites par les singularités géométriques de surface. Les calculs, qui méritent d'être complétés par d'autres surfaces plus rugueuses, montrent pour le moment que l'introduction d'une rugosité comprise entre zéro et quelques pourcent de la taille de

grain conduit à une profondeur de perturbation qui est de quelques dixièmes de la taille de grain. Ceci signifie que la deuxième rangée de grain n'est que très peu perturbée. L'influence relative est d'autant plus grande que la taille de grain est grande.



**Figure 4.** (a) Dispersion du rapport  $R(\sum \gamma_{cum}, k_r)$  en fonction de la distance à la surface libre dans le cas de l'agrégat pad-291. (b) Distance critique déterminée en fonction du paramètre de rugosité  $R_q$ , pour différentes tailles moyennes de grain, tout ceci normé par la taille de grain.

## 4 Conclusion

L'effet individuel de la rugosité de surface sur les champs mécaniques locaux des polycristaux a été étudié sur des microstructures à différentes tailles de grains. Les profils de localisation de déformation plastique, initialement dus à l'orientation cristallographique des grains, se trouve modifiée en présence de rugosité de surface, ce qui met en lumière la compétition entre la rugosité et la texture locale dans le phénomène de localisation. Les motifs de localisation sont affectés en surface libre de l'agrégat mais également en volume. La taille de la zone perturbée par les singularités géométriques est linéairement liée au rayon moyen de courbure de ces défauts de surface et à la taille de grain. Une taille de grain implique une zone moins profonde.

Ces observations sont à prendre en considération dans une démarche visant à mettre en place un critère de fatigue à l'échelle mésoscopique, basée sur une analyse statistique des distributions des champs locaux, et ce en prenant en compte l'état de surface des composants industriels. On peut toutefois noter que la modélisation proposée ici reste éloignée de la réalité car un seul paramètre de l'état de surface a été introduit. L'intégration progressive des autres paramètres, séparée dans un premier temps, puis couplée, permettra d'affiner et préciser ces conclusions.

## Références

1. B. Ma, C. Laird. *Acta Mat.* **37**, 325 (1989)
2. L. Méric, G. Cailletaud. *J. of Engng. Mat. Technol.* **113** 171-182 (1991).
3. Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J-M. Stéphan, G. Cailletaud. *Int J Fatigue.* **32** 1748-1763 (2010).
4. C. Déprés, C.F. Robertson, M.C. Fivel. *Mater. Sci. Eng.* **A387–389** 288–291 (2004).
5. K. Makhlof, N. Sidhom, A. Khelifi, H. Sidhom, C. Braham, *Materials and Design* **52** 1088-1098 (2013).
6. Y. Guilhem, S. Basseville, F. Curtit, J-M. Stéphan, G. Cailletaud. *Comp. Mater. Sci.* **70** 150-162 (2013).