

# Sujet : Modélisation des effets d'échelle sur les mécanismes de fissuration.

26 Novembre 2021  
Club Cast3M 2021

Présenté par : Soukaina RIAD

Julien RÉTHORÉ : Directeur de thèse

Didier BARDEL : Encadrant Industriel

## Sujet de thèse

# Modélisation de la corrosion sous contrainte du superalliage 718 sous flux neutronique

## Sujet de thèse

# Modélisation de la corrosion sous contrainte du superalliage 718 sous flux neutronique

Modélisation de la fissuration

Modélisation de la corrosion

Modélisation de l'irradiation



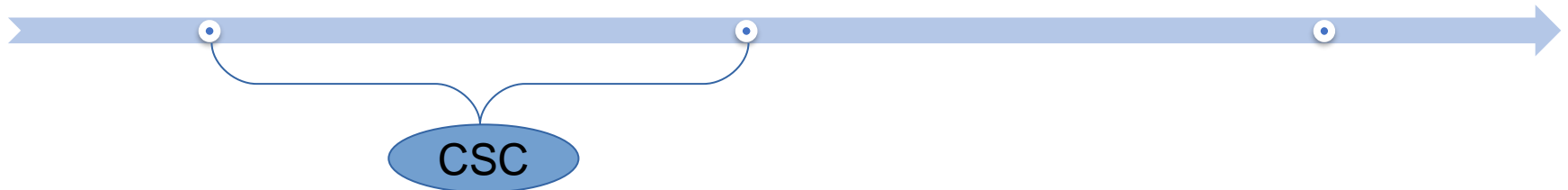
## Sujet de thèse

# Modélisation de la corrosion sous contrainte du superalliage 718 sous flux neutronique

Modélisation de la fissuration

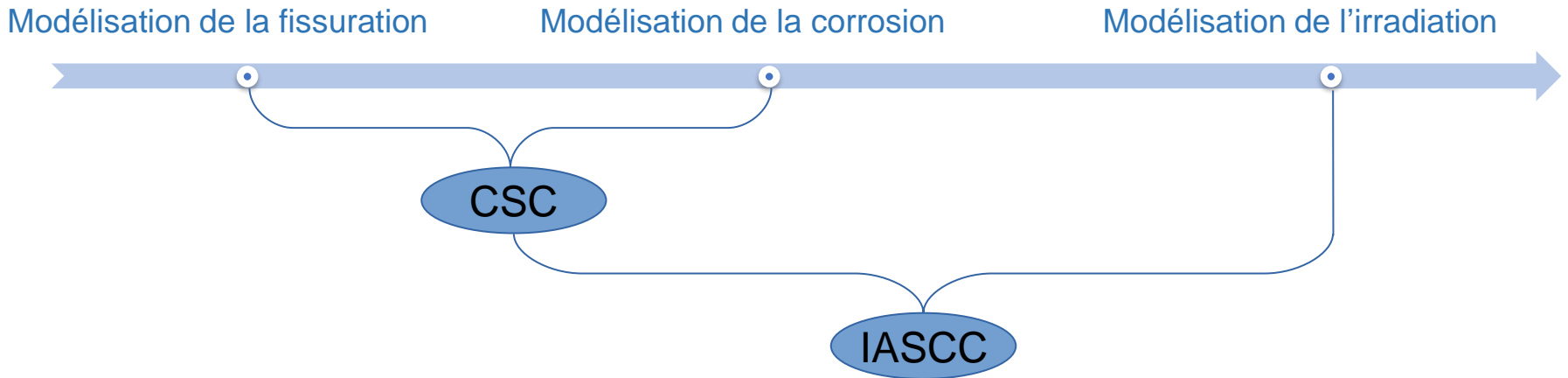
Modélisation de la corrosion

Modélisation de l'irradiation



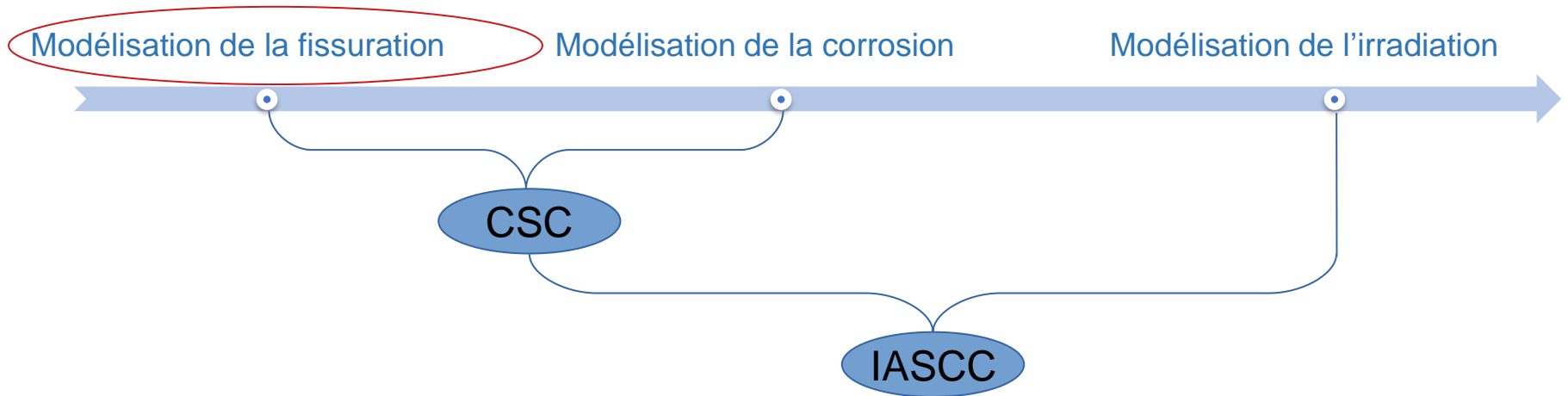
## Sujet de thèse

# Modélisation de la corrosion sous contrainte du superalliage 718 sous flux neutronique

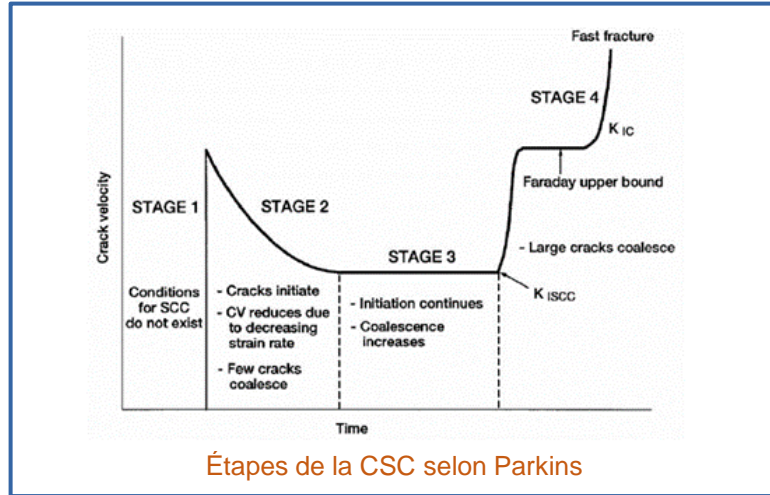


## Sujet de thèse

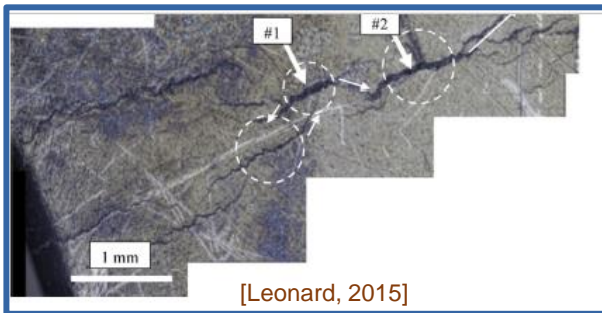
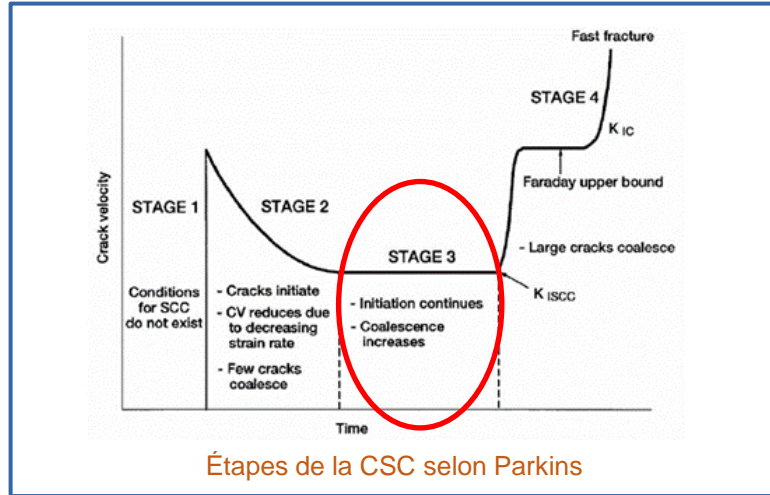
# Modélisation de la corrosion sous contrainte du superalliage 718 sous flux neutronique



# Choix du modèle de fissuration

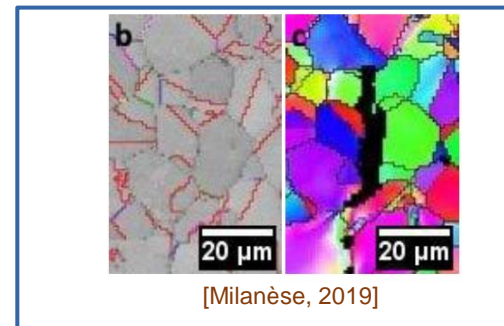
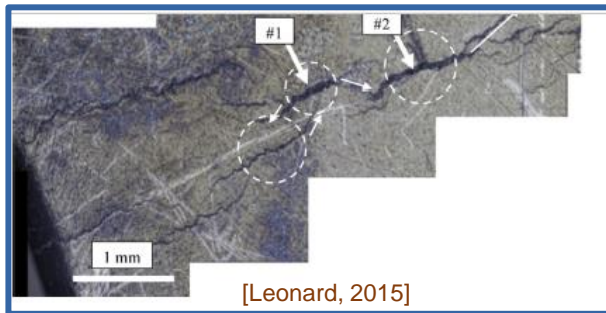
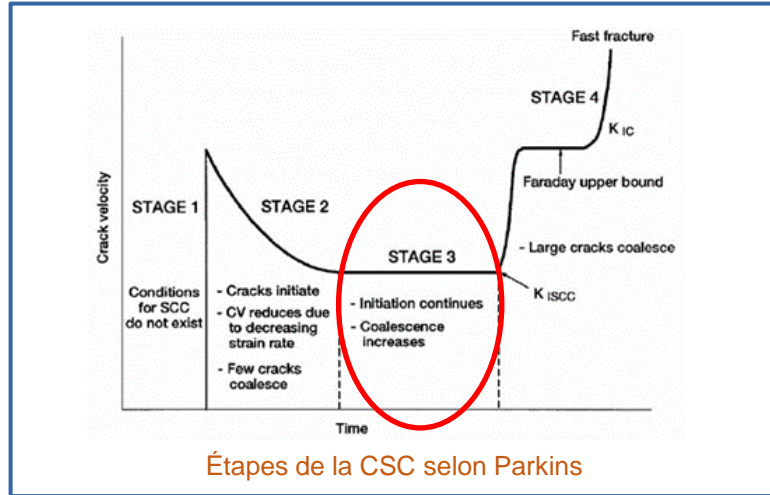


# Choix du modèle de fissuration





# Choix du modèle de fissuration



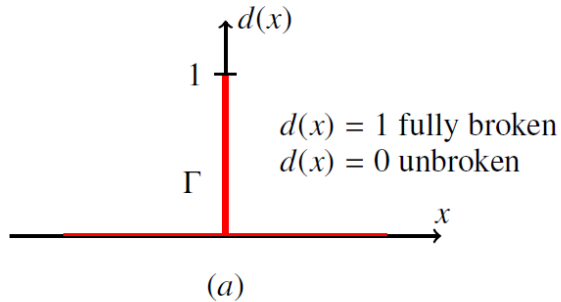
# Sommaire

- 1 Principe du modèle de champ de phase (PhF)
- 2 PhF à l'échelle du polycristal
- 3 PhF dans le milieu de Cosserat
- 4 Applications
- 5 Conclusions et Perspectives

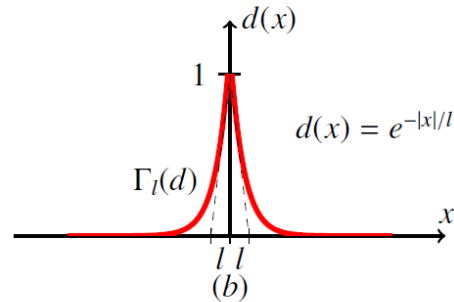
# 1. Principe du modèle de champ de phase (PhF)

# 1.a. Présentation de la variable d'endommagement

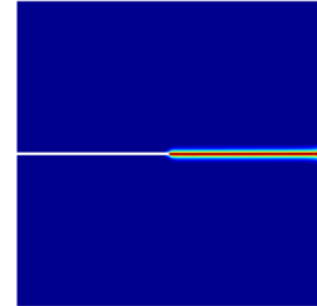
Le modèle de champ de phase est conçu pour modéliser des systèmes avec des surfaces de discontinuité



Fissure (locale)



Fissure diffuse (non locale)



[Miehe, 2015]

$d$  est un champ qui permet de différencier la phase endommagée ( $d=1$ ) et la phase intacte ( $d=0$ ).

$l$  est un paramètre qui permet de régler la distance sur laquelle la phase endommagée est diffusée.

## 1.b. Formulation du problème d'endommagement

Le processus de propagation d'une fissure est gouverné par un problème de minimisation d'énergie.

La densité d'énergie libre est :  $W = W_u(\varepsilon(u), d) + G_c \gamma(d)$

- L'énergie nécessaire pour créer une fissure (Critère de Griffith)  $G_c \gamma(d) = G_c \left( \frac{1}{2l} d^2 + \frac{l}{2} |\nabla d|^2 \right)$

- L'énergie de déformation :

$$W_u(\varepsilon(u), d) = \overbrace{(1-d)^2}^{g(d) \text{ fonction d'endommagement}} \Psi^+ + \Psi^-$$

$$\Psi^+ = \frac{1}{2} K_0 \langle \text{tr}(\varepsilon) \rangle_+^2 + \mu \varepsilon_{dev} : \varepsilon_{dev}$$

Énergie de traction et de cisaillement

$$\Psi^- = \frac{1}{2} K_0 \langle \text{tr}(\varepsilon) \rangle_-^2$$

Énergie de compression

## 1.b. Formulation du problème d'endommagement

### Évolution de l'endommagement

- Pour assurer le caractère irréversible de propagation de fissures, une fonction d'histoire  $H$  est introduite qui mesure la valeur maximale de la force motrice d'endommagement :

$$H(x, t) = \max_{\tau \in [0, t]} \Psi^+(x, \tau)$$

- D'après l'inégalité de Clausius-Duhem, la positivité de dissipation conduit à l'équation gouvernante du problème des champs de phase :

$$2(1-d)H - \frac{G_c}{l}(d - l^2 \Delta d) = 0 \text{ sur } \Omega$$

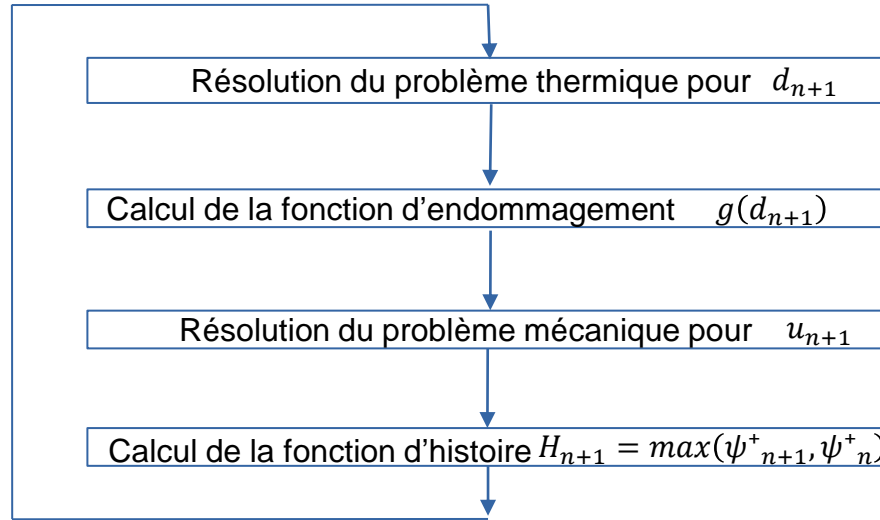
$$\nabla d(x) \cdot \underline{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega$$

avec  $\nabla d(x) \cdot \underline{n} = 0$  la condition aux limites naturelle sur les bords du système.

## 1.c. Algorithme de résolution sur Cast3M

Initialisation de la fonction d'histoire  $H_0$

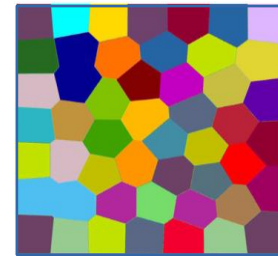
$\forall n \geq 1$



## 2. PhF à l'échelle du polycristal



## 2.a. Fissuration transgranulaire



### Directions préférentielles de propagation de fissures :

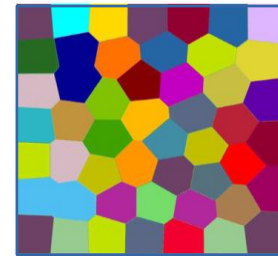
La propagation de fissures dans les cristaux s'effectue dans des plans préférentiels (dits de clivage) selon la symétrie cristallographique. Pour respecter ces plans préférentiels de propagation, nous introduisons dans l'expression de la densité de surface fissurée, le terme  $\omega$  qui permet de pénaliser la propagation de fissuration dans les directions normales au plan de clivage :

$$\gamma(d) = \left( \frac{1}{2l} d^2 + \frac{l}{2} \omega : (\nabla d \otimes \nabla d) \right)$$

tel que:  $\omega = 1 + \beta(1 - M \otimes M)$

avec  $M$  le vecteur normal au plan de clivage.  
 $\beta$  le coefficient de directionnalité.

## 2.a. Fissuration transgranulaire



### Directions préférentielles de propagation de fissures :

La propagation de fissures dans les cristaux s'effectue dans des plans préférentiels (dits de clivage) selon la symétrie cristallographique. Pour respecter ces plans préférentiels de propagation, nous introduisons dans l'expression de la densité de surface fissurée, le terme  $\omega$  qui permet de pénaliser la propagation de fissuration dans les directions normales au plan de clivage :

$$\gamma(d) = \left( \frac{1}{2l} d^2 + \frac{l}{2} \omega : (\nabla d \otimes \nabla d) \right)$$

tel que:  $\omega = 1 + \beta(1 - M \otimes M)$

avec  $M$  le vecteur normal au plan de clivage.  
 $\beta$  le coefficient de directionnalité.

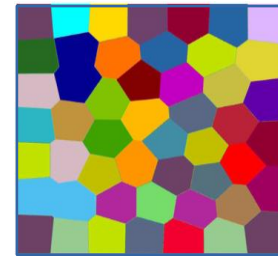
### Multi-fissuration dans le cristal :

Les cristaux possèdent plusieurs plans de clivage, ce qui donne lieu à des multi-fissurations dans le cristal. Pour représenter ce phénomène, nous introduisons dans le formalisme des PhF autant de variables d'endommagement  $d_i$  que de plans de clivage. L'interface totale de surface fissurée sera donc exprimée comme une sommation des multiples interfaces de fissuration par les équations suivantes :

$$\Gamma_l(d_i, w_i) = \sum_i \Gamma_l^i(d_i, w_i) = \sum_i \int_{\Omega} \gamma_i(d_i, \nabla d_i, \omega_i) d\Omega$$

$$W = W_u(\varepsilon(\underline{u}), d_i) + G_c \sum_i \int_{\Omega} \gamma_i(d_i, \nabla d_i, \omega_i).$$

## 2.a. Fissuration transgranulaire



### Directions préférentielles de propagation de fissures :

La propagation de fissures dans les cristaux s'effectue dans des plans préférentiels (dits de clivage) selon la symétrie cristallographique. Pour respecter ces plans préférentiels de propagation, nous introduisons dans l'expression de la densité de surface fissurée, le terme  $\omega$  qui permet de pénaliser la propagation de fissuration dans les directions normales au plan de clivage :

$$\gamma(d) = \left( \frac{1}{2l} d^2 + \frac{l}{2} \omega : (\nabla d \otimes \nabla d) \right)$$

tel que:  $\omega = 1 + \beta(1 - M \otimes M)$

avec  $M$  le vecteur normal au plan de clivage.  
 $\beta$  le coefficient de directionnalité.

### Multi-fissuration dans le cristal :

Les cristaux possèdent plusieurs plans de clivage, ce qui donne lieu à des multi-fissurations dans le cristal. Pour représenter ce phénomène, nous introduisons dans le formalisme des PhF autant de variables d'endommagement  $d_i$  que de plans de clivage. L'interface totale de surface fissurée sera donc exprimée comme une sommation des multiples interfaces de fissuration par les équations suivantes :

$$\Gamma_l(d_i, w_i) = \sum_i \Gamma_l^i(d_i, w_i) = \sum_i \int_{\Omega} \gamma_i(d_i, \nabla d_i, \omega_i) d\Omega$$

$$W = W_u(\varepsilon(\underline{u}), d_i) + G_c \sum_i \gamma_i(d_i, \nabla d_i, \omega_i).$$

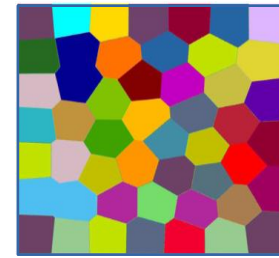
$$g(d_i) = \prod_i (1 - d_i)^2.$$

$$2(1 - d_i) \prod_{j \neq i} (1 - d_j)^2 W_u^+ - G_c \delta \gamma(d, \nabla d, \omega) = 0$$

$$\mathcal{H}_i(\underline{x}, t) = \max_{\tau \in [0, t]} \left\{ \prod_{j \neq i} (1 - d_j)^2 W_u^+(\underline{x}, \tau) \right\}.$$

2021 | 19

## 2.b. Fissuration intergranulaire



### Variation spatiale des propriétés mécaniques :

Pour produire la fissuration intergranulaire, il est nécessaire de pouvoir introduire une hétérogénéité de comportement (ténacité) à l'échelle du polycristal. Par conséquent, nous avons choisi pour notre modèle, basé sur le critère de Griffith (énergie nécessaire pour créer une unité de surface) de distribuer spatialement une variation de propriétés mécaniques via l'utilisation du  $G_c$  variable :

$$G_{cv} = \frac{G_c^B + G_c^{GB}}{2} + \frac{G_c^B - G_c^{GB}}{2} \sin \left( \min \left( \frac{\pi}{2}, \frac{-\pi}{2} + \pi \left( \frac{|\Psi|}{e_p^*} \right)^3 \right) \right)$$

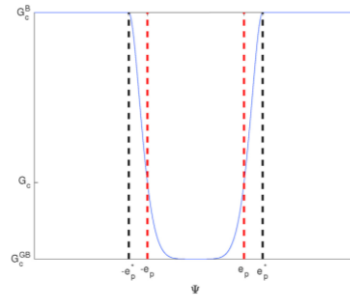
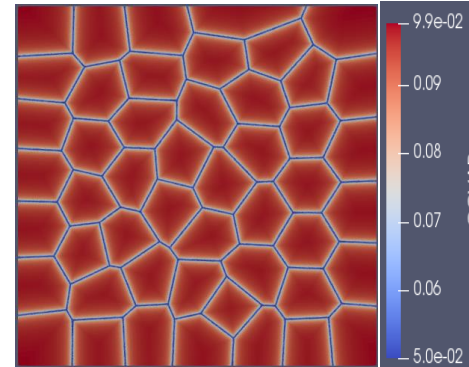


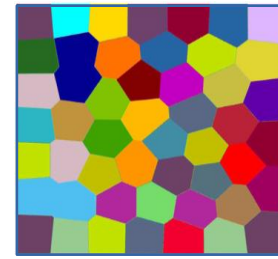
Fig. 2. Fracture energy variation for the chosen sinusoidal function with the fictitious thickness.



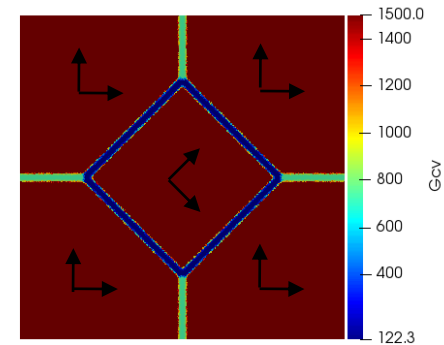
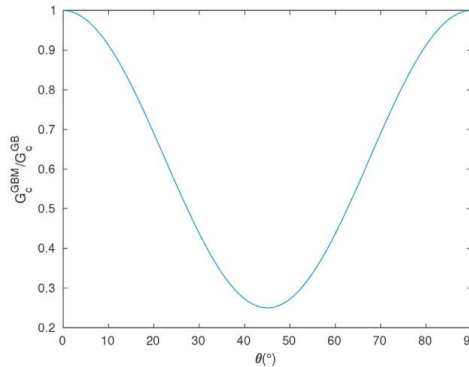
**Proposition de l'ajout d'un nouveau champ de phase, avec  $G_c$  hétérogène, capable de modéliser des fissurations intergranulaires.**

## 2.b. Fissuration intergranulaire

### Effet de la désorientation des joints de grain :

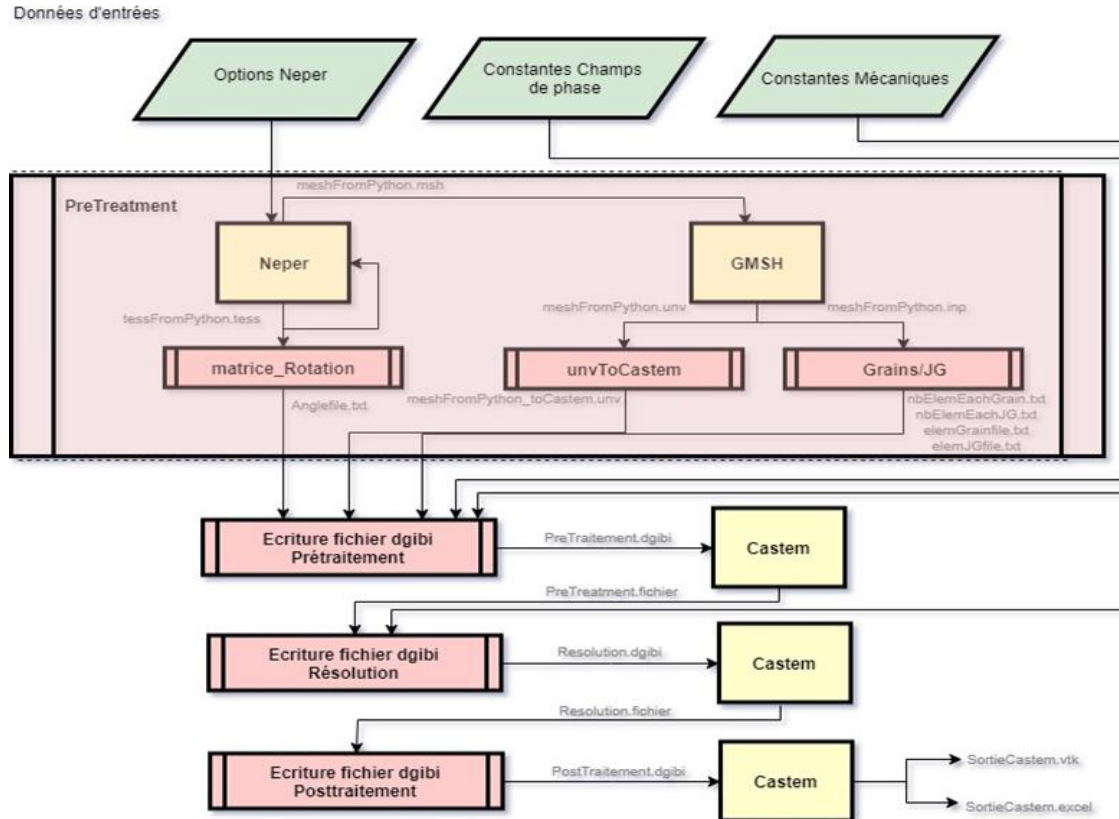


Nous proposons de pouvoir rendre compte de l'hétérogénéité de ténacité des joints de grain, par exemple ici, via l'effet de leurs désorientations  $\theta$ , calculée à partir des matrices de rotation des deux grains qui le sépare.



[RIAD, 2021]

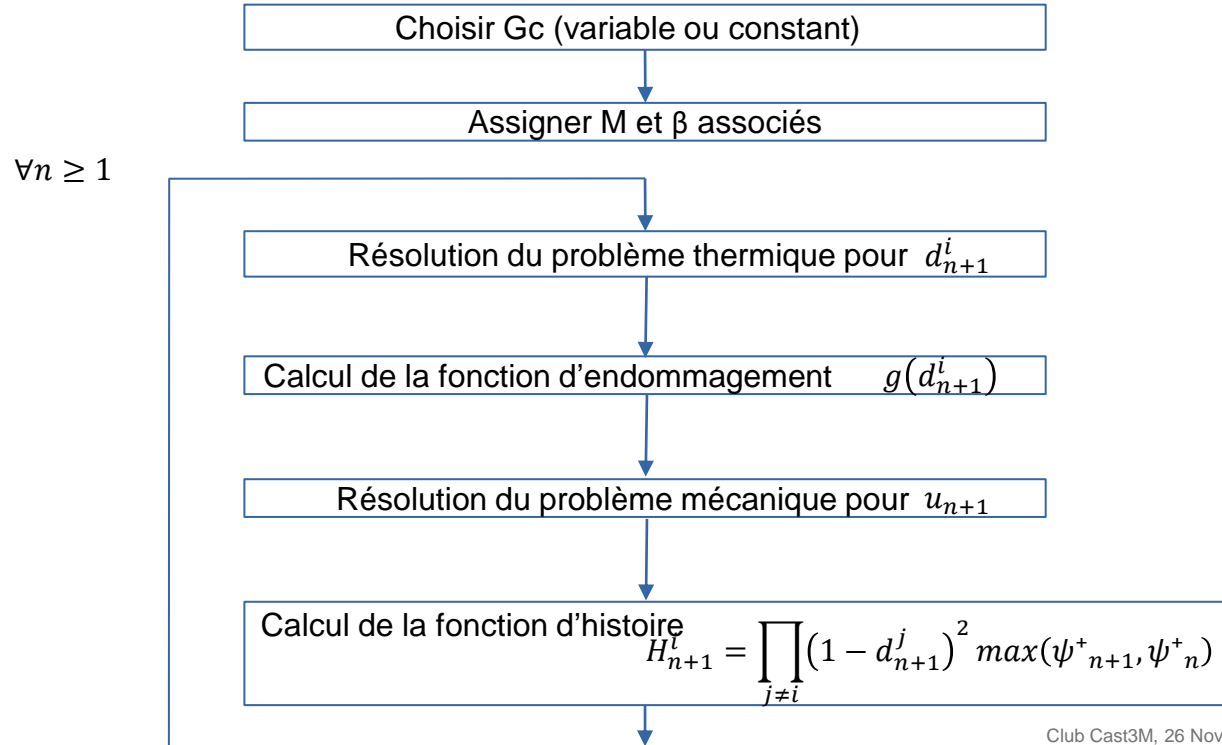
## 2.c. Schéma d'implémentation



## 2.d. Algorithme de résolutions sur Cast3M

Initialisation de la fonction d'histoire  $H_0^i$

Pour chaque champ d'endommagement  $d^i$



## 3. PhF dans le milieu de Cosserat

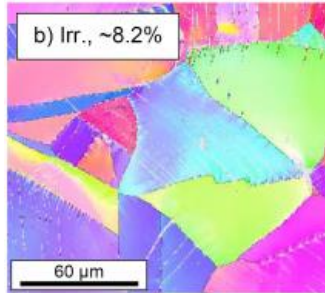


### 3.a. Le milieu de Cosserat

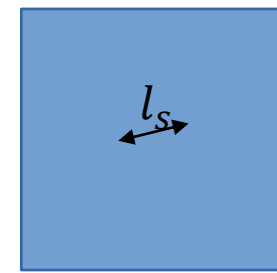
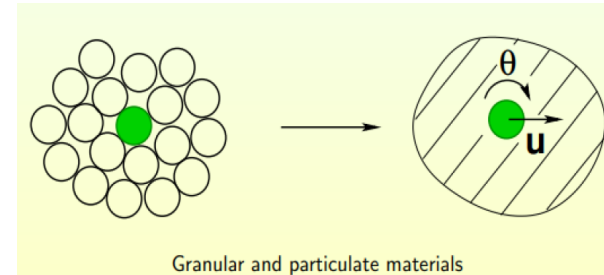
Nous proposons de rendre compte des effets de la microstructure par la longueur interne des milieux généralisés.

#### Choix du milieu de Cosserat :

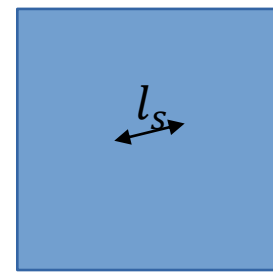
Dans les mesures EBSD, des gradients de micro-rotation au niveau des grains sont observés. Donc, nous avons choisis le milieu de Cosserat qui propose un degré de liberté micro-rotation supplémentaire au degré de déplacement :



$$DOF = \{\underline{u}, \underline{\theta}\}$$



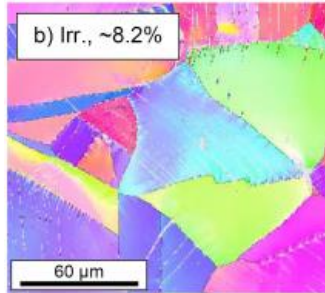
### 3.a. Le milieu de Cosserat



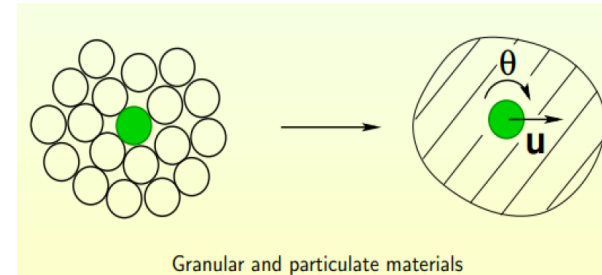
Nous proposons de rendre compte des effets de la microstructure par la longueur interne des milieux généralisés.

#### Choix du milieu de Cosserat :

Dans les mesures EBSD, des gradients de micro-rotation au niveau des grains sont observés. Donc, nous avons choisis le milieu de Cosserat qui propose un degré de liberté micro-rotation supplémentaire au degré de déplacement :



$$DOF = \{\underline{u}, \underline{\theta}\}$$



Ce qui donne lieu aux mesures de déformation suivante :

$$e = \underline{u} \otimes \nabla + \epsilon. \underline{\theta}$$

$$\kappa = \underline{\theta} \otimes \nabla$$

La loi de Hooke généralisée dans le milieux de Cosserat :

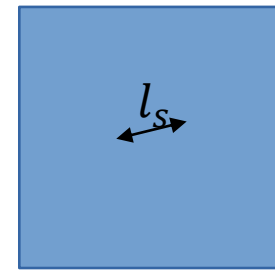
$$\sigma = \lambda \text{tr}(e)I + 2\mu e^s + 2\mu_c e^a,$$

$$M = \alpha \text{tr}(\kappa)I + 2\beta \kappa^s + 2\gamma \kappa^a.$$

$$\text{En 2D : } \alpha = 0$$

$$\text{Et pour simplifier : } \beta = \gamma$$

## 3.b. Implémentation des champs de phase dans le milieu de Cosserat

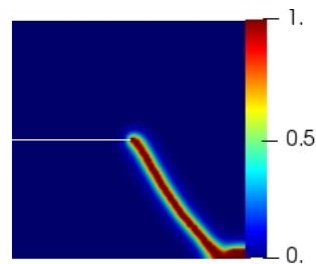


La densité d'énergie élastique dans le milieu de Cosserat est composée de deux termes relatifs aux mesures de déformation :

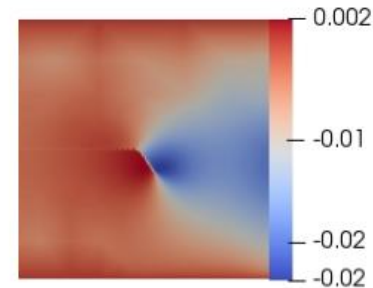
$$W_{\underline{u}, \underline{\theta}}(e, \kappa) = \frac{1}{2} e : A : e + \frac{1}{2} \kappa : E : \kappa.$$

Le formalisme de PhF reste valable dans le milieu de Cosserat. La force motrice de l'endommagement qui change car elle doit prendre en compte en plus l'énergie de courbure, telle que :

$$W = g(d)W_{\underline{u}, \underline{\theta}}^+(e, \kappa) + W_{\underline{u}, \underline{\theta}}^-(e, \kappa) + G_c \gamma(d, \nabla d).$$

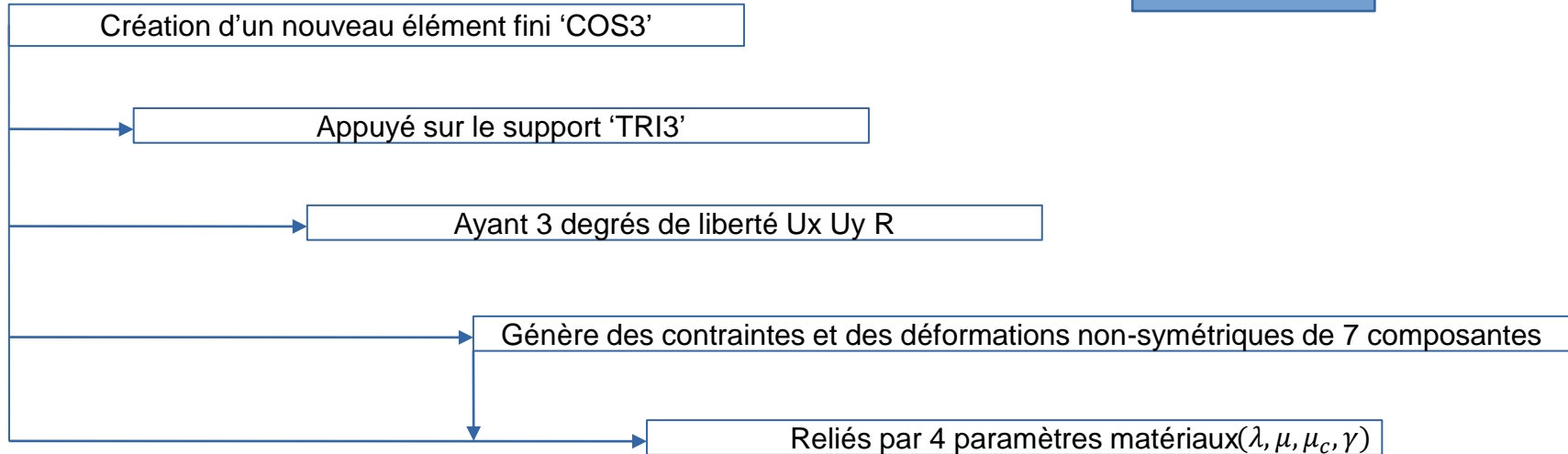
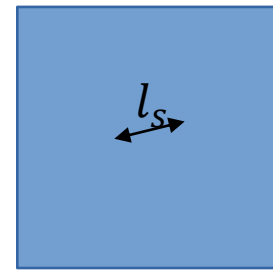


champ de phase  $d$



micro-rotation  $\theta$

### 3.c. Développement sur Cast3M en 2D

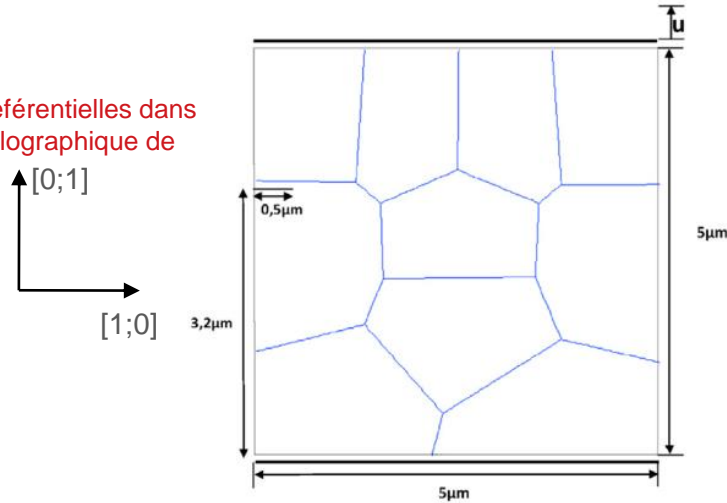


## 4. Applications

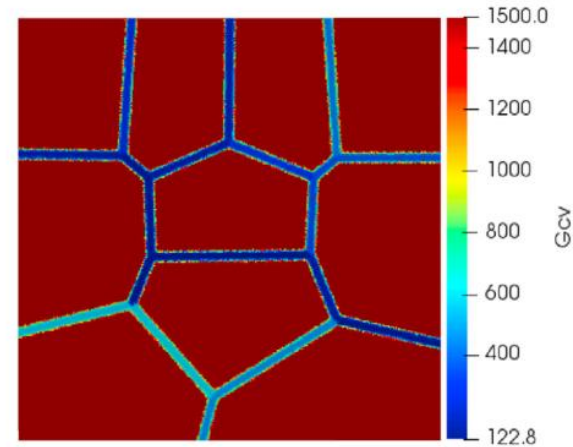
## 4.a. Méthode des champs de phase à l'échelle du polycristal

### Test de traction

2 Directions préférentielles dans le repère cristallographique de chaque grain



Géométrie et Conditions aux limites



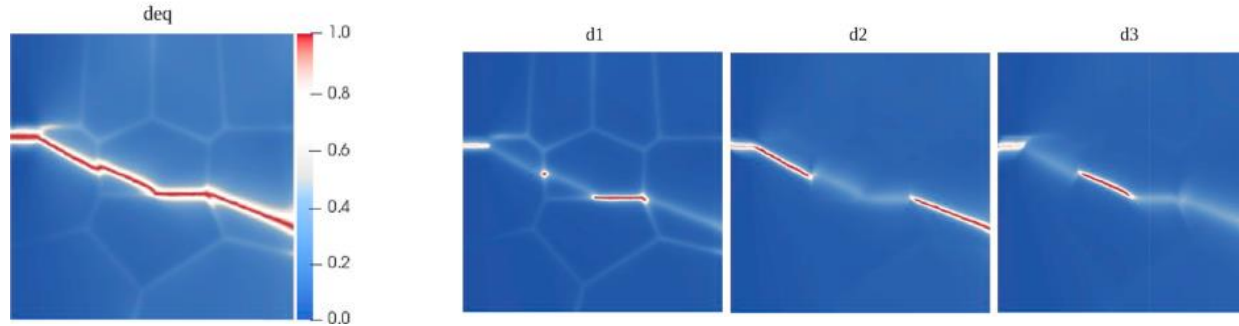
Distribution spatiale de variation de  $G_c$  avec prise en compte des effets de la désorientation

- Deux plans de clivages pour cet exemples, qui correspondent aux directions cristallographiques  $[1;0]$  et  $[0;1]$ .
- Le champ d'endommagement équivalent est calculé par la formule :

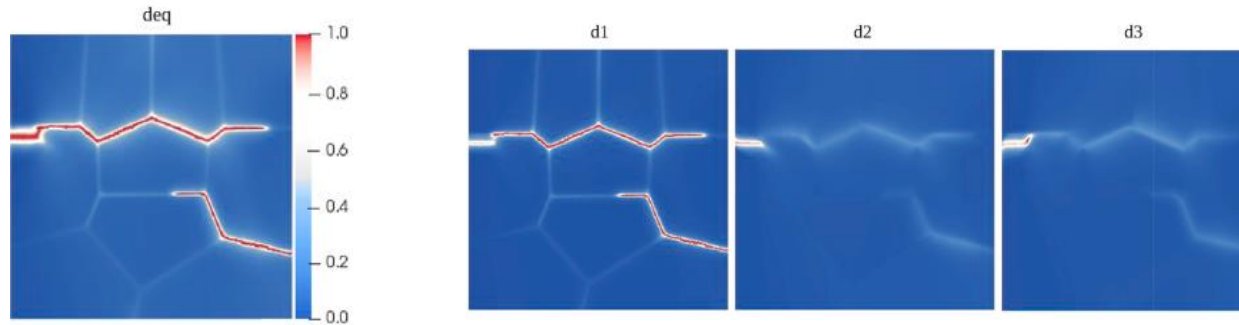
$$d_{eq} = 1 - \prod_i (1 - d_i)$$

## 4.a. Méthode des champs de phase à l'échelle du polycristal

- i. sans effet de désorientation



- ii. avec effet de désorientation

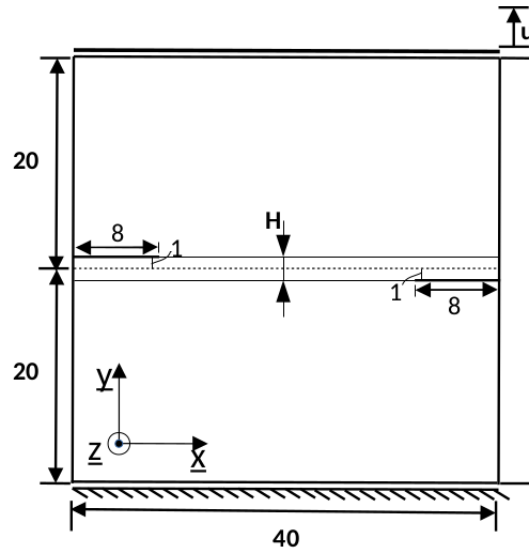


[RIAD, 2021]

Effet de désorientation => changement du mécanisme de fissuration activé.

## 4.b. Modèle des champs de phase dans le milieu de Cosserat

### Test de coalescence



Géométrie et Conditions aux limites

La longueur interne du milieu de Cosserat:

$$l_s = \sqrt{\frac{\gamma}{\mu_c}}$$

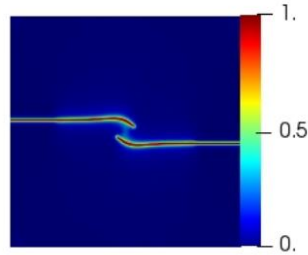
Définition d'un rapport de structure (ratio entre la longueur interne et la distance entre fissures):

$$R_s = \frac{l_s}{H}$$

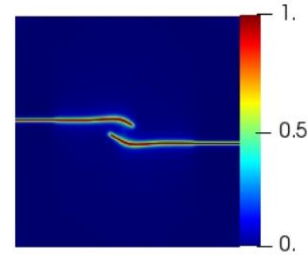
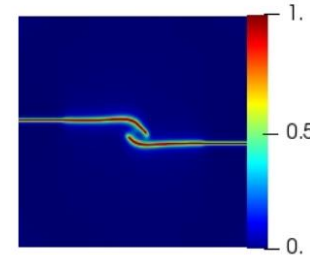
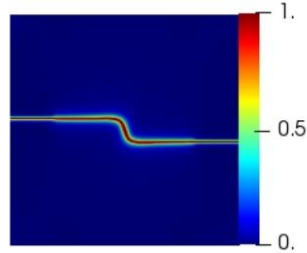
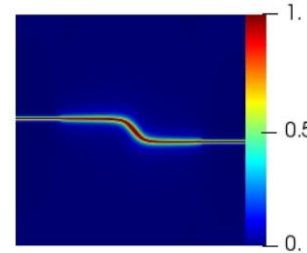


## 4.b. Modèle des champs de phase dans le milieu de Cosserat

$$R_s = \frac{l_s}{H}$$











(a) Cauchy media

(b)  $R_s = 0.43$ (c)  $R_s = 0.86$ (d)  $R_s = 1.72$ (e)  $R_s = 3.44$ 

$R_s$  augmente  $\Rightarrow$  activation des effets micro sur des distances plus grandes  $\Rightarrow$  coalescence des fissures.

## 5. Conclusions et Perspectives

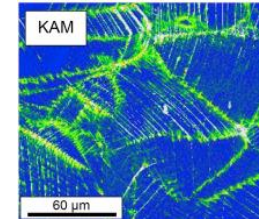
## 5.a. Conclusions

-  **Implémentation de la méthode de PhF sous Castem.**
-  **Implémentation de la méthode de PhF à l'échelle du polycristal sous Castem :**
  -  **Fissuration transgranulaire : effet de la directionnalité, variable d'endommagement par plan de clivage.**
  -  **Fissuration intergranulaire : variable d'endommagement dédiée avec Gc hétérogène, effet de désorientation.**
-  **Implémentation de PhF dans le milieu de Cosserat :**
  -  **Développement d'un nouveau élément fini sous castem.**
  -  **Prise en compte des effets de la microstructure dans un milieu homogène par la longueur interne du milieu de Cosserat.**
-  **Mise en évidence de l'importance de la microstructure sur la cinétique de propagation des fissures courtes (amorçage et coalescence).**

## 5.b. Perspectives

### Irradiation :

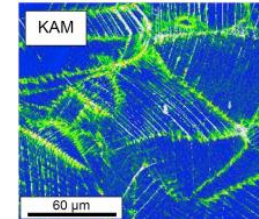
- L'irradiation induit des défauts à l'échelle des grains.
- Nécessité de rendre compte des effets de ces hétérogénéités.
- Utilisation du milieu de Cosserat comme modèle de grain dans le polycristal



## 5.b. Perspectives

### Irradiation :

- L'irradiation induit des défauts à l'échelle des grains.
- Nécessité de rendre compte des effets de ces hétérogénéités.
- Utilisation du milieu de Cosserat comme modèle de grain dans le polycristal



### Corrosion sous contraintes :

- Diffusion des espèces assistée par la contraintes.
- La dégradation du matériau assistée par la diffusion.
- Couplage chimio-mécanique faible.

