



HAL
open science

**Analyse et modélisation micromécanique du
comportement et de la rupture fragile de l'acier
16MND5: prise en compte des hétérogénéités
microstructurales**

Jean-Philippe Mathieu

► **To cite this version:**

Jean-Philippe Mathieu. Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5: prise en compte des hétérogénéités microstructurales. Sciences de l'ingénieur [physics]. Arts et Métiers ParisTech, 2006. Français. NNT : 2006ENAM0037 . pastel-00002143

HAL Id: pastel-00002143

<https://pastel.hal.science/pastel-00002143>

Submitted on 20 Feb 2007

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.



Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Metz

Ecole doctorale n° 432 : Science des Métiers de l'Ingénieur

THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur

de

l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Spécialité : "Mécanique et Matériaux"

présentée et soutenue publiquement par :

Jean-Philippe MATHIEU

le 23 octobre 2006

ANALYSE ET MODÉLISATION MICROMÉCANIQUE DU COMPORTEMENT ET DE LA RUPTURE FRAGILE DE L'ACIER 16MND5 : PRISE EN COMPTE DES HÉTÉROGÉNÉITÉS MICROSTRUCTURALES

Directeur de thèse : M. Karim INAL

Codirecteur de thèse : M^{me} Sophie BERVEILLER

Jury :

M ^{me} Sophie BERVEILLER	Maître de conférences	LPMM - ENSAM Metz	Examineur
M ^{me} Colette REY	Professeur	LMSSMat - Paris XIII	Rapporteur
M. Philippe BOMPARD	Professeur	LMSSMat - Centrale Paris	Rapporteur
M. Michel BORNERT	Enseignant chercheur	LMS - Polytechnique Palaiseau	Invité
M. Georges CAILLETAUD	Professeur	CdM - ENSM Paris	Examineur
M. Olivier DIARD	Docteur ingénieur	EDF R&D Les Renardières	Examineur
M. Karim INAL	Maître de conférences - HDR	Mecasurf - ENSAM Aix-en-P.	Examineur
M. Bernard MARINI	Docteur ingénieur	CEA Saclay	Invité

**Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux - UMR CNRS 7554
ENSAM, CER de Metz**

L'ENSAM est un Grand Etablissement dépendant du Ministère de l'Education Nationale, composé de huit centres :
AIX-EN-PROVENCE ANGERS BORDEAUX CHÂLONS-EN-CHAMPAGNE CLUNY LILLE METZ PARIS

En souvenir d'Auguste M. et de Charles C.

The most exciting phrase to hear in science, the one that heralds new discoveries, is not "Eureka!", but "That's funny...". Isaac Asimov

Avant-propos

Ce travail est le fruit d'une collaboration active entre le Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux de Metz et le centre de recherche d'Electricité De France des Renardières. Pour m'avoir accueilli au sein de leur équipe respective, je remercie le directeur du LPMM Etienne Patoor à Metz et Sylvie Jayet-Gendrot puis Christophe Varé, responsables successifs du groupe T26 chez EDF. Je remercie aussi toutes les personnes, à Moret-sur-Loing comme à Metz qui m'ont permis de m'intégrer facilement dans mes lieux de travail, et de me sentir, ici ou là, un peu chez moi.

L'avenir dira si ce manuscrit en valait la peine, mais je me dois de remercier cordialement Colette Rey et Philippe Bompard d'avoir accepté la longue tâche d'être les rapporteurs de ces travaux. Merci aussi à Georges Cailletaud et Bernard Marini d'avoir pu, et bien voulu donner un peu de leur temps pour participer au jury.

Lorsqu'on est "thésard", on apprécie toujours d'avoir une aide, quelle qu'elle soit. J'ai pu compter à l'ENSAM et chez EDF sur l'aide bienvenue d'équipes techniques ou administratives serviables et efficaces qui ont certainement leur part dans l'accomplissement de ces travaux. Tout particulièrement, merci à Marc Wary et Denis Bouscaud pour leur aide, leur bonne humeur et leur disponibilité en ce qui concerne la partie expérimentale. J'exprime aussi mes vifs remerciements à Jacques Besson qui a bien voulu m'apprendre à lire dans les entrailles du code ZéBuLon. D'autres noms devraient s'ajouter à cette liste mais risqueraient de la rendre interminable. Leurs propriétaires voudront bien m'excuser de ce piètre raccourci.

Partager ses joies et ses peines et oublier les petits tracés qui ne manquent pas de jalonner un travail d'aussi longue haleine ne se fait pas sans un peu de détente. La pause-café entre thésards doit avoir été inventée pour cela, dans la foulée du repas arrosé avec modération. Ils ont joué pendant trois ans pleinement leur rôle. Merci donc à tous mes compagnons de route qui m'ont permis de ne jamais me sentir seul. Qu'ils aient une théorie fumeuse à défendre, un avis à partager, un hébergement classieux ou une douceur à offrir, j'imagine bien qu'ils se reconnaîtront. Que nos chemins se croisent à nouveau ou pas, je leur souhaite à tous bon vent.

Par sa réactivité, ses conseils avisés, sa patience parfois, l'encadrement du doctorant fait que le chemin est plus ou moins difficile à suivre. Tout au long de ces trois années de travail, par leurs qualités propres, mes encadrants m'ont aidé à trouver ma voie. Merci à Karim Inal de m'avoir transmis son enthousiasme et son goût de la curiosité, à Sophie Berveiller pour sa sympathie et ses conseils avisés, et à Olivier Diard d'avoir su être un soutien si solide à de multiples points de vue. Le fait qu'ils aient tous trois rempli ce rôle avec amitié et en harmonie ne fait qu'ajouter à mon devoir de les remercier.

Je remercie pour finir avec une grande affection tous les membres de mon entourage : mes amis pour leur bonne humeur communicative, mes parents et mes soeurs pour leur confiance et leur soutien indéfectible sans lequel je ne serais peut-être pas en train d'écrire ces lignes. Merci enfin à Emeline pour la patience dont elle sait parfois faire preuve, son soutien dans les moments difficiles, et tout simplement pour sa présence à mes côtés.

P.S. : Une fois l'agitation de la fin de thèse retombée, je me rends compte, en effet, que les noms oubliés étaient nombreux. Leurs propriétaires voudront bien...

Table des matières

I	Introduction générale	9
I.1	Contexte industriel	10
I.2	Enjeux	10
I.3	Démarche Proposée	11
	Bibliographie	14
II	Microstructure et comportement macroscopique à froid	15
II.1	Étude bibliographique de la microstructure et du comportement macroscopique	16
II.1.1	L'acier 16MND5 : une microstructure bainitique revenue	16
II.1.2	Comportement de l'acier 16MND5	21
II.1.3	Caractéristiques mécaniques des constituants	23
II.2	Contribution à la caractérisation de la microstructure	32
II.2.1	Répartition des carbures	32
II.2.2	Morphologie de la phase ferritique	35
II.3	Représentation synthétique de la microstructure	38
	Bibliographie	40
III	Hétérogénéités mécaniques à basse température	43
III.1	Aspects expérimentaux	44
III.1.1	Machine de traction <i>in-situ</i>	44
III.1.2	Description des essais réalisés	47
III.1.3	Analyse de contraintes par DRX	48
III.2	Observations des hétérogénéités à basses températures	52
III.2.1	Observations réalisées <i>in-situ</i>	52
III.2.2	Observations au MEB-FEG d'éprouvettes <i>post-mortem</i>	55
III.2.3	Effets "composite" et "polycristal"	58
III.3	Hétérogénéités de contraintes quantifiées par DRX	59
III.3.1	Répartition des contraintes entre les phases : essais de traction <i>in-situ</i> et DRX	59
III.3.2	Hétérogénéités au sein de la phase ferritique : oscillations et blocs de cristaux	64
III.4	Discussion	69
	Bibliographie	72
IV	Comportement multi-échelles	73
IV.1	Comportement de la ferrite : étude bibliographique des modélisations	74
IV.1.1	Introduction : les échelles inférieures	74
IV.1.2	Élasticité	76

IV.1.3	Composante anélastique de la déformation	77
IV.1.4	Description de la plasticité cristalline	79
IV.1.5	Description de l'écrouissage	82
IV.2	Les méthodes d'homogénéisation	85
IV.2.1	Le passage micro-macro : une prise en compte des microstructures	85
IV.2.2	Notions fondamentales - notations	88
IV.2.3	Modèles de transition d'échelles analytiques	91
IV.2.4	Le calcul de microstructures par éléments finis.	96
IV.3	Choix des modèles et hypothèses	104
IV.3.1	La stratégie de modélisation : une approche multi-échelle	104
IV.3.2	Le monocristal de ferrite	106
IV.3.3	Le composite ferrite-cémentite	107
IV.3.4	L'agrégat polycristallin	109
IV.3.5	La procédure d'identification et d'optimisation des paramètres	112
IV.4	Identification du comportement : validation des résultats	114
IV.4.1	Modélisation de l'effet "Composite"	116
IV.4.2	Modélisation à l'échelle de l'agrégat	128
IV.4.3	Comparaison avec la DRX, validation de la représentation de l'effet "polycristal"	138
	Bibliographie	145
V	Approche locale micromécanique du clivage	153
V.1	Remarques préliminaires	154
V.2	Étude bibliographique	155
V.2.1	Mécanismes et explications de la rupture fragile par clivage	155
V.2.2	Revue des études sur la rupture par clivage des aciers	163
V.2.3	Modélisations de la rupture par clivage, les approches statistiques	176
V.3	Une approche locale à l'échelle microscopique	193
V.3.1	Mise en place du problème	193
V.3.2	Méthodologie de traitement des simulations : obtention d'une probabilité de rupture cumulée	194
V.3.3	Comparaison de l'allure de la probabilité avec celle de l'approche de Beremin	201
V.3.4	Étude paramétrique	201
V.3.5	Comparaison de la démarche utilisée avec des données expérimentales	207
V.3.6	Effet du chargement sur les paramètres de Weibull	208
V.3.7	Discussion	216
	Bibliographie	221
VI	Conclusion et perspectives	227
VI.1	Synthèse	228
VI.2	Perspectives	230
VI.2.1	Caractérisation expérimentale	230
VI.2.2	Modélisation du comportement	230
VI.2.3	Modélisation de la rupture	231
A-I	Courbes de comportement à basses températures	233

A-II	Méthodes expérimentales mises en oeuvre	235
A-II.1	Microscopie électronique et EBSD	235
A-II.1.1	EBSD (Electron Back-Scattered Diffraction)	236
A-II.1.2	Images MEB-FEG	237
A-II.2	La diffraction des Rayons X	237
A-II.2.1	Principes de base	237
A-II.2.2	Méthode des $\sin^2\psi$: détermination de la contrainte macroscopique dans une direction	243
A-II.2.3	Méthode des Blocs De Cristaux (BDC), détermination des contraintes par orientation cristallographique	243
A-II.3	Difficultés expérimentales liées à la machine de traction <i>in-situ</i> - étalonnage	244
A-III	Calcul de microstructure	247
A-III.1	Technique des polyèdres de Voronoï	247
A-III.2	Les conditions aux limites en calcul de microstructure.	249
A-III.2.1	Conditions aux limites périodiques (CLP)	249
A-III.2.2	Déformation Homogène au Contour (DHC)	250
A-III.2.3	Contrainte homogène au contour (CHC)	251
A-III.2.4	Effet des CAL	252
A-IV	Choix de modélisation pour la ferrite	255
A-IV.1	Dénomination des systèmes de glissement	255
A-IV.2	Équivalence entre élastoplasticité et élasto-viscoplasticité	255
A-IV.3	Écrouissage	258
A-IV.3.1	Choix de la formulation isotrope	258
A-IV.3.2	Forme de la matrice d'écrouissage	258
A-IV.3.3	Implémentation dans le code de calcul	258
A-V	Prise en compte du champ de contrainte corrigé pour l'étude de la rupture	263
	Bibliographie	267

Chapitre -I-

Introduction générale

Sommaire

I.1	Contexte industriel	10
I.2	Enjeux	10
I.3	Démarche Proposée	11
	Bibliographie	14

I.1 Contexte industriel

Dans le cadre de sa politique énergétique, Électricité De France (EDF) envisage un prolongement de la durée de vie des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) qui constituent la principale technologie du parc nucléaire actuellement en service en France. C'est dans cette optique que de nombreuses études ont été et sont toujours lancées sur les divers composants critiques de ces réacteurs pour en assurer la sûreté en cas d'allongement de durée de vie. Ces études passent notamment par une meilleure compréhension des modes de déformation, d'endommagement et de rupture des matériaux constituant les différents organes des centrales. L'acier 16MND5 forgé, qui est l'un des principaux constituants des cuves de réacteur, est ainsi l'une des préoccupations majeures au sein des équipes de recherche d'EDF, mais aussi d'autres groupes européens utilisant le même type d'installations.

Ce travail de thèse, succédant à celui de Raphaël Pesci [Pesci, 2004] notamment, mais aussi à ceux déjà engagés depuis de nombreuses années [Rossol, 1998, Renevey, 1998, Carassou, 1999, Tanguy, 2001, Hausild, 2002, Sekfali, 2004], s'inscrit dans une démarche continue de recherche en amont des problématiques posés. Cette recherche est soutenue par EDF, notamment au travers de divers projets de collaboration, tel le projet PERFECT qui réunit les principaux acteurs européens du nucléaire. L'enjeu ambitieux de ce projet est une connaissance accrue de la physique régissant le comportement et la rupture de l'acier de cuve. La démarche du projet PERFECT consiste en l'étude des propriétés du matériau en passant par toutes les échelles que la physique et la mécanique des matériaux mettent à disposition, allant de la simulation atomistique à la prévision de durée de vie par calcul de structure. Chaque modélisation à une échelle bénéficie donc en cascade des résultats des travaux des échelles précédentes, qui lui fournissent tout ou partie de l'ensemble des données d'entrée. Les échelles inférieures peuvent également renseigner sur la pertinence des mécanismes mis en jeu.

I.2 Enjeux

Une rupture fragile sur site n'a jamais été observée. Une telle rupture sur une pièce aussi importante aurait bien évidemment des conséquences tout à fait catastrophiques, mais à aucun moment elle n'est considérée comme probable. Les essais en laboratoire montrent qu'une propagation fragile de la rupture n'est pas envisageable dans les conditions d'utilisation. Le régime de fonctionnement donne plutôt lieu à une propagation de fissure ductile stable. Cependant, l'exploitant doit montrer que les marges de sécurité sont respectées pour tous les incidents que peut subir une cuve et que son intégrité est assurée. En cas d'incident critique au sein du réacteur, la cuve est la seconde barrière de confinement entre le combustible et l'environnement.

Un accident de type perte de réfrigérant primaire (APRP), par exemple, entraînerait l'injection dans la cuve d'un réfrigérant auxiliaire à température ambiante, la température

de fonctionnement étant habituellement de 320°C. La situation transitoire induite pourrait amener à une gamme de températures où le matériau pourrait être fragile. Par ailleurs, les conditions de service entraînent un vieillissement de la cuve, dû à une irradiation prolongée, qui peut favoriser la rupture par clivage.

Aux basses températures, les aciers de cuve rompent de manière fragile par clivage intragranulaire. L'étude de la rupture du matériau pour ces basses températures se justifie pleinement pour étudier d'une façon commode la rupture par clivage, sur un matériau non irradié.

Dans le cas présent, on observe qu'une description de la ténacité de l'acier 16MND5 sur une large plage de température couvrant les domaines fragile et ductile se heurte à la grande dispersion de cette ténacité à l'approche de la transition fragile-ductile (figure I.1).

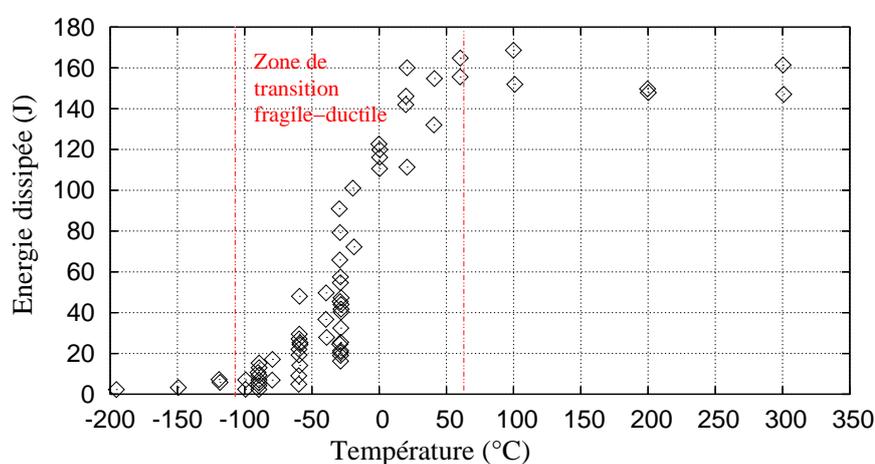


FIG. I.1 – Énergie à rupture des éprouvettes Charpy en fonction de la température ; résultats obtenus par Renevey et Rossol sur le matériau BQ12 [Rossol, 1998, Renevey, 1998].

Ainsi, si les approches globales de la rupture permettent de prendre en compte cette statistique de dispersion de manière descriptive ou phénoménologique, l'exploitant reste intéressé par toute approche visant à expliquer les micromécanismes mis en jeu dans cette dispersion.

I.3 Démarche Proposée

Ce travail s'inscrit dans la réponse au besoin industriel de maîtriser non seulement la description des propriétés des matériaux, mais aussi la détermination de leurs propriétés en lien direct avec leurs microstructures.

Cela passe tout d'abord par l'utilisation de méthodes expérimentales de caractérisation. Le but est pour ces travaux d'obtenir une description la plus fine possible de la morphologie

et du comportement du matériau, de quantifier les hétérogénéités mécaniques apparaissant en cours de sollicitation, et surtout de relier ces hétérogénéités à la morphologie de la microstructure (orientation de réseau cristallin, présence de carbures, d'interfaces). On peut en effet supposer assez naturellement un lien entre la dispersion de ténacité et les fortes hétérogénéités locales des champs mécaniques, elles-mêmes liées à la microstructure. Toute cette étude de caractérisation expérimentale fait l'objet du chapitre II, à la fin duquel on propose une vision synthétique de la microstructure.

Une fois la microstructure caractérisée, le chapitre III expose l'utilisation de diverses méthodes de caractérisation des hétérogénéités mécaniques en cours de déformation plastique à basses températures. Que cela soit par des observations qualitatives (microscopie avec traction *in-situ*) ou des méthodes plus quantitatives (diffraction des rayons X), on dégage deux grandes sources d'hétérogénéités, dues à la microstructure : la nature polycristalline du matériau et la présence d'amas de carbures, observées et décrites précédemment sont les principales causes de l'apparition de ces hétérogénéités.

La communauté mécanicienne française est par ailleurs à la base de deux avancées majeures en termes de modélisation prédictive du comportement et de la rupture des matériaux : l'approche locale de la rupture [Beremin, 1983], et les approches micromécaniques avec démarches d'homogénéisation par calcul de microstructure [Cailletaud et al., 2003]. Ces deux outils seront mis en relation dans ces travaux afin d'améliorer le caractère prédictif de la modélisation de la rupture par clivage de l'acier de cuve.

Les approches micromécaniques associées aux démarches d'homogénéisation sont un outil de choix pour la modélisation du comportement macroscopique permettant de prendre en compte plusieurs échelles de description. Les récentes avancées du calcul de microstructure, liées à l'augmentation des puissances de calcul disponibles, permettent de plus d'accéder aux distributions des champs mécaniques à l'échelle intragranulaire, jusqu'à inaccessible par les approches utilisant les modèles à champs moyens. On expose donc au chapitre IV une méthodologie complexe de modélisation multi-échelles basée sur le calcul de microstructure à l'échelle de l'agrégat polycristallin. Localement, à chaque point d'intégration, un modèle de transition d'échelles est de plus utilisé pour représenter l'effet de la cémentite au sein de la microstructure. Par ailleurs, on met en oeuvre un processus de vérification des résultats obtenus à chaque échelle, par rapport aux échelles contiguës, mais aussi en regard des résultats expérimentaux obtenus au chapitre précédent.

L'approche locale de la rupture propose pour sa part une description locale de la statistique de rupture d'un élément de volume, basée sur des hypothèses qui découlent de la compréhension des micromécanismes locaux, et permet de prévoir la durée de vie des composants. Les micromécanismes de rupture par clivage sont connus. Néanmoins, on les traduit souvent dans les divers travaux de l'approche locale en terme de probabilité en émettant des hypothèses sur le lien entre leurs effets et la description analytique de la probabilité de rupture d'un volume élémentaire. Le chapitre V permet de faire le lien

naturel entre les hypothèses sur les micromécanismes et la probabilité de rupture d'un volume élémentaire : on y utilise la richesse des informations locales en déformation et en contrainte obtenues en calcul de microstructure pour en déduire la probabilité de rupture cumulée de l'agrégat, en se basant sur un critère micromécanique réaliste de rupture.

C'est l'intérêt majeur de cette étude : on y développe un outil à fondé sur les méthodes micromécaniques, à même de prendre en compte d'une manière naturelle et explicite l'effet de la microstructure sur la statistique de rupture fragile par clivage d'un volume élémentaire, qui pourra servir d'entrée à l'approche locale de la rupture. Les résultats de ces travaux sont donc directement exploitables dans le cadre de l'approche locale.

Bibliographie

- [Beremin, 1983] BEREMIN F.M. (1983). *A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel*. Metall. Trans. A, vol. 14, pp 2277–2287.
- [Cailletaud et al., 2003] CAILLETAUD G., FOREST S., JEULIN D., FEYEL F., GALLIET I., MOUNOURY V., ET QUILICI S. (2003). *Some elements of microstructural mechanics*. Comput. Mat. Sci., vol. 27, pp 351–374.
- [Carassou, 1999] CARASSOU S. (1999). *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : Rçae de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Hausild, 2002] HAUSILD P. (2002). *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Pesci, 2004] PESCI R. (2004). *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Renevey, 1998] RENEVEY S. (1998). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay - CEA.
- [Rossol, 1998] ROSSOL A. (1998). *Détermination de la ténacité d'un acier faiblement allié çapartir de l'essai Charpy instrumenté*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Sekfali, 2004] SEKFALI S. (2004). *Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Tanguy, 2001] TANGUY B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.

Chapitre -II-

Microstructure et comportement macroscopique à froid

Sommaire

II.1	Étude bibliographique de la microstructure et du comportement macroscopique	16
II.1.1	L'acier 16MND5 : une microstructure bainitique revenue	16
II.1.2	Comportement de l'acier 16MND5	21
II.1.3	Caractéristiques mécaniques des constituants	23
II.2	Contribution à la caractérisation de la microstructure	32
II.2.1	Répartition des carbures	32
II.2.2	Morphologie de la phase ferritique	35
II.3	Représentation synthétique de la microstructure	38
	Bibliographie	40

Introduction

Ce chapitre est l'occasion de présenter la microstructure initiale du matériau étudié, l'acier 16MND5, ainsi que ses principales caractéristiques mécaniques. Les caractéristiques des constituants (ferrite et cémentite) sont également évoquées.

La première partie porte sur la recherche bibliographique des travaux qui concernent ces deux aspects. La provenance de la nuance étudiée est évoquée, ainsi que son mode d'obtention, pour aboutir à la description de sa microstructure et de ses caractéristiques en se focalisant sur les constituants. Les principales caractéristiques mécaniques macroscopiques du matériau sont ensuite rappelées, ainsi que les modes de déformation observés expérimentalement pour ses deux principaux constituants : ferrite et cémentite.

Enfin, la contribution de ces travaux à l'analyse de la microstructure est présentée : celle-ci se base principalement sur les informations obtenues par des observations en microscopie électronique.

On conclut par une représentation synthétique de la microstructure qui facilitera l'étape de représentation lors de la modélisation.

II.1 Étude bibliographique de la microstructure et du comportement macroscopique

II.1.1 L'acier 16MND5 : une microstructure bainitique revenue

a) Provenance du matériau

L'acier 16MND5 (équivalent à la nuance ASTM A508 Cl.3), est un acier faiblement allié. Il possède une structure de bainite revenue. Il est utilisé pour forger les viroles qui, une fois assemblées, forment la cuve de nombreuses centrales nucléaires européennes (figure II.1). Le matériau fourni par EDF et utilisé pour cette étude provient d'un coupon prélevé lors de la fabrication d'une virole porte-tubulure (B) de la cuve Q12. Nous le dénommerons par commodité BQ12. Le prélèvement a été fait au 3/4 de l'épaisseur dans la découpe, afin d'éviter la présence de veines sombres, riches en phosphore. Sa composition chimique est rappelée dans le tableau II.1.

Afin de mieux comprendre son comportement, et aussi dans le but de fournir un modèle prédictif performant, une bonne connaissance de sa microstructure initiale est essentielle. Elle permet de dégager les informations morphologiques qui sont utilisées pour

C	S	P	Mn	Si	Ni	Cr	Mo
0,159	0,008	0,005	1,37	0,24	0,7	0,17	0,50
V	Cu	Co	Al	N	O	Sn	As
< 0,01	0,06	< 0,01	0,023	0,007	35 ppm	50 ppm	160 ppm

TAB. II.1 – Composition chimique de l’acier de cuve BQ12 étudié (pourcentages massiques)
[Renevey, 1998].

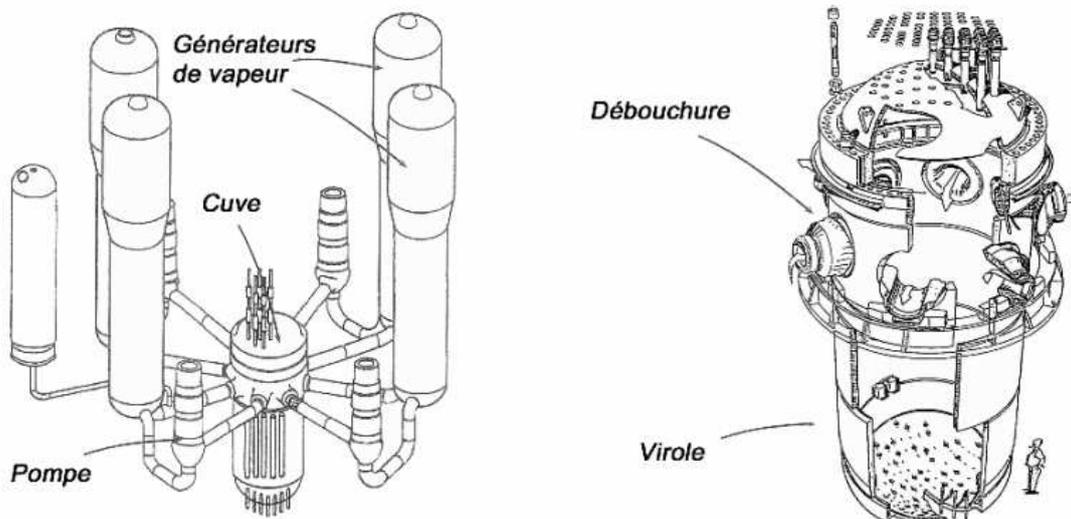


FIG. II.1 – Un réacteur REP avec une vue générale en coupe partielle de la cuve.

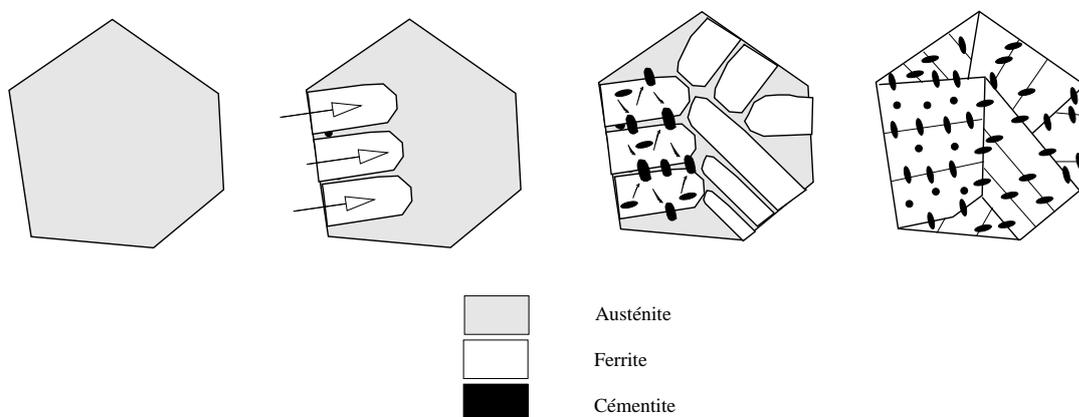


FIG. II.2 – Les différentes étapes de la transformation bainitique.

la représentation synthétique de cet acier. Enfin, elle facilite la compréhension des diverses hétérogénéités mécaniques observées expérimentalement.

b) **Élaboration - microstructure obtenue**

L'acier de cuve se présente, à l'état d'équilibre du diagramme de phases, comme un mélange de ferrite et de cémentite. Toutefois le matériau subit une série de traitements thermiques qui modifie sa structure :

- 2 austénitisations, d'une durée de 4h40 chacune, à une température comprise entre 865°C et 895°C, suivies chacune d'une trempe à l'eau,
- un traitement de revenu de 7h30 à une température comprise entre 630°C et 645°C,
- un traitement de détensionnement des contraintes internes de 8h à 610°C.

Ces traitements permettent d'obtenir une bainite revenue. Lors des refroidissements des deux premiers traitements, la ferrite commence à croître sous formes de lattes depuis les joints de grains austénitiques, voire à l'intérieur des grains depuis un défaut de microstructure : impureté, joint d'un paquet de lattes déjà formé (figure II.2). Le carbone, peu soluble dans la ferrite, va alors précipiter en cémentite entre les lattes, où subsiste par ailleurs un faible taux d'austénite résiduelle. Celle-ci sera transformée pendant le revenu. Le mélange de ferrite et de cémentite forme la bainite.

c) **Les principaux constituants et leur répartition**

La microstructure obtenue est donc un mélange de bainite (elle-même constituée de ferrite et de cémentite) et de ferrite. La cémentite est présente aussi bien sur les anciens joints de grains austénitiques qu'entre les lattes de ferrite. Enfin, on observe la présence d'inclusions de sulfure de manganèse (MnS).

Dans la suite des travaux, et peut-être par abus de langage, le terme bainite sera plutôt utilisé pour décrire le matériau dans sa globalité, et non pas uniquement la bainite dite supérieure, qui, elle, sera plutôt qualifiée comme une ferrite chargée en cémentite. La communauté scientifique spécialisée étant divisée sur la nature même et sur le processus de formation de la bainite [Takahashi, 2004], il convient de préciser l'emploi du terme 'bainite' qui est fait ici pour lever toute ambiguïté.

Les inclusions de sulfure de manganèse (MnS) Les inclusions présentes dans le matériau (carbures mis à part) sont majoritairement des sulfures de manganèse. Leur formation précède l'étape de mise en forme par forgeage. C'est bien évidemment la forte teneur en manganèse (utilisé notamment pour améliorer la trempabilité de l'acier et pour durcir la phase ferritique) qui favorise l'apparition de ces inclusions. Tanguy [Tanguy, 2001] montre qu'ils sont majoritairement purs, mais qu'on peut en trouver contenant des noyaux d'oxydes divers.

Il est intéressant de noter [Hausild, 2002] que ces particules restent les dernières traces de l'étape de mise en forme : si les traitements thermiques font disparaître toute trace d'anisotropie au sein des autres constituants, la forme allongée de certains MnS qui est due à leur déformation en cours de forgeage subsiste (figure II.4). Les inclusions de sulfure de manganèse ont une forme ellipsoïdale parfois très allongée dans la direction de fibrage (notée L comme montré en figure II.3). Leur dimension dans la direction L est généralement comprise entre 5 et 50 μm , alors qu'elle est plutôt limitée à la dizaine de micromètres dans les directions T et S.

La fraction volumique de ce constituant peut être déterminée par la technique d'analyse d'images [Hausild, 2002], (ce qui permet de déterminer une fraction f_v de l'ordre de 10^{-3}) ou par l'utilisation de la formule de Franklin [Renevey, 1998] :

$$f_v = 0,054 \left(\%S - \frac{0,001}{\%Mn} \right) + 0,05\%O = 5,7 \cdot 10^{-4} \quad (2.1)$$

où les pourcentages sont exprimés en masse. Ces deux résultats sont donc relativement cohérents. Il semble important toutefois de préciser que le matériau BQ12 utilisé dans ces travaux est relativement différent des autres aciers de cuve au niveau de la fraction volumique de MnS. Il est en effet beaucoup plus riche en inclusions que la plupart des matériaux équivalents utilisés pour les autres cuves du parc nucléaire, sans qu'il ait été possible d'en déterminer la cause exacte.

De nombreux travaux ont été menés afin d'étudier l'influence de cette phase sur la rupture fragile ou ductile de l'acier 16MND5. Plusieurs travaux [Renevey, 1998, Carassou, 1999] ont notamment pris en compte leur présence dans une modélisation de la rupture par approche locale. Les observations expérimentales de rupture fragile à froid permettent aussi de tirer des conclusions quant à leur rôle de déclencheur de la rupture. Leur rupture prématurée induit un phénomène de concentration de contrainte au sein de la microstructure qui facilite l'amorçage du clivage [Pesci, 2004, Hausild, 2002].

La cémentite La cémentite est le deuxième principal constituant du matériau. Sa répartition n'est pas du tout homogène, comme il a été vu au paragraphe c). L'apparition de carbures de compositions différentes de celle de la cémentite est possible (carbures ϵ). Leur composition est Fe_xC avec x compris entre 2,3 et 3.

La cémentite intergranulaire est finalement la dernière trace directement observable des anciens joints de grains austénitiques. Ces carbures atteignent des tailles supérieures aux carbures se formant au sein de la ferrite [Carassou, 1999] (figure II.5). Le joint de grains est l'un des sites privilégiés de leur germination et de leur croissance (environ $1\mu\text{m}$ contre 100nm).

Les carbures précipités au sein des paquets de ferrite (intragranulaires) ont une forme sphéroïdale ou d'aiguilles (figure II.20). Ces carbures forment des îlots à l'intérieur des lattes de ferrite. Ils ne sont donc pas du tout répartis de manière homogène [Hausild, 2002, Pesci, 2004].

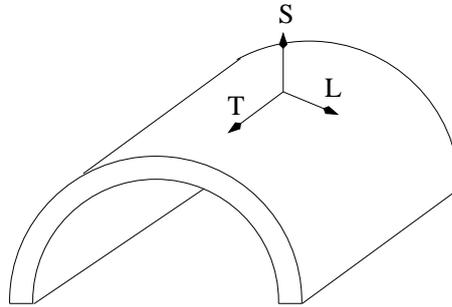


FIG. II.3 – Repérage des direction par rapport à la géométrie de mise en forme de la cuve.

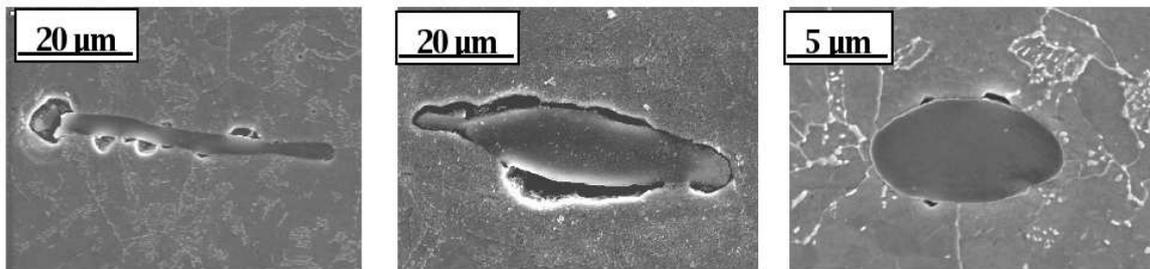


FIG. II.4 – Différentes inclusions de sulfure de manganèse [Pesci, 2004].

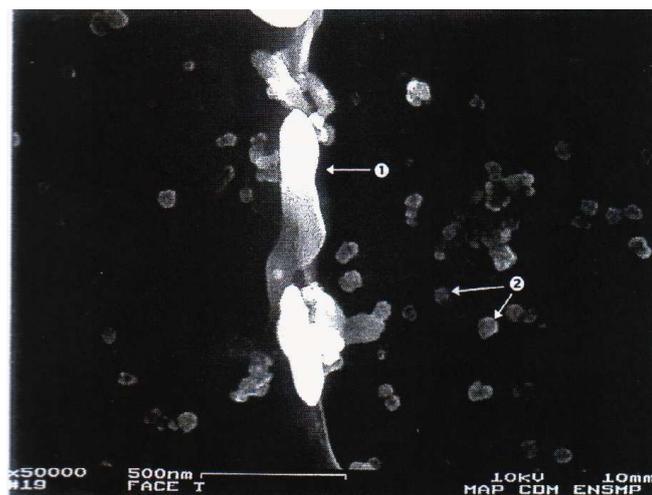


FIG. II.5 – Carbures observés au MEB, aux anciens joints austénitiques (1) et dans la ferrite (2) [Carassou, 1999].

Morphologie et répartition de la ferrite Une revue détaillée de la cristallographie de microstructures bainitiques proches de l'acier 16MND5 est disponible dans les travaux de thèse de Lambert [Lambert-Perlade, 2001]. Lors de la croissance des lattes de ferrite (cf. II.1.1.b)), les relations d'orientation entre la ferrite (α) formée et l'ancien grain austénitique (γ) sont décrites par les relations de Kurdjumov-Sachs (K-S) ou de Nishiyama-Wassermann (N-W), qui sont rappelées à l'équation 2.2 [Kelly, 1992] :

$$\text{et } \left\{ \begin{array}{l} (111)_{\gamma} \parallel (101)_{\alpha} \\ ([1\bar{1}0]_{\gamma} : [11\bar{1}]_{\alpha}) = \eta \\ ([1\bar{2}1]_{\gamma} : [10\bar{1}]_{\alpha}) = 5,25 - \eta \end{array} \right. \quad (2.2)$$

$$\text{ou } \left\{ \begin{array}{l} \eta = 0^{\circ} (\text{relation KS}) \\ \eta = 5,26^{\circ} (\text{relation NW}) \end{array} \right.$$

Ainsi l'orientation d'une latte de ferrite est en partie déterminée par l'orientation du grain austénitique à partir duquel elle croît : un plan dense austénitique sera parallèle à un plan dense de la ferrite formée, et une direction dense de la ferrite sera de la même façon parallèle à une direction dense de l'austénite. Gourgues *et al.* [Gourgues et al., 2000] établissent ainsi un histogramme théorique des angles de désorientation¹ entre les paquets ferritiques provenant d'un même grain austénitique. En comparant cet histogramme à la distribution obtenue par Haušild [Hausild, 2002] sur les lattes d'un ancien grain austénitique, on peut constater que ces relations décrivent correctement ce que l'on observe expérimentalement² (figure II.6).

Il semble difficile de distinguer les anciens joints de grains austénitiques des joints formés entre les paquets de lattes de ferrite du point de vue de la désorientation. Seule la présence de carbures de taille plus importante permet de distinguer facilement les anciens joints austénitiques. Lors de l'apparition des variants d'orientation de ferrite, ceux-ci croissent sous forme d'entités communément définies comme des lattes. Ces lattes forment des paquets de même orientation. L'observation correcte de ces lattes passe par l'utilisation d'une Microscopie Electronique à Transmission (MET), éventuellement d'un microscope MEB-FEG ([Morris et al., 2003, Karlik et al., 2003, Obrtlík et al., 2006], figure II.7.a).

II.1.2 Comportement de l'acier 16MND5

a) Traction quasi-statique

Renevey [Renevey, 1998] fournit dans sa thèse des courbes de traction idéalisées. En effet, les courbes de traction à basses températures de l'acier 16MND5 présentent lors de l'entrée en plasticité un palier en contrainte, le palier de Lüders, pendant lequel se produisent

¹La désorientation entre deux lattes est définie comme l'angle de la plus petite rotation à faire subir à l'une des deux lattes pour la mettre dans une configuration similaire à l'autre.

²Les techniques expérimentales associées à ces observations sont évoquées au chapitre suivant.

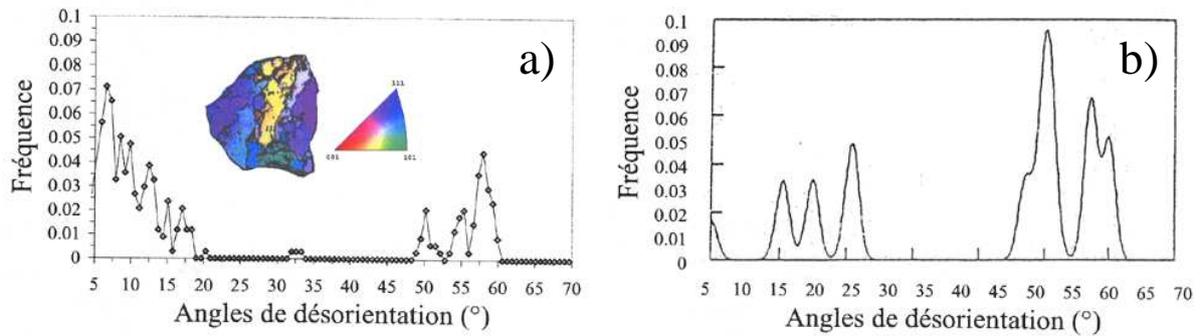


FIG. II.6 – Comparaison entre : a) la distribution expérimentale des désorientations et b) entre les lattes d'un ancien grain austénitique [Hausild, 2002] et la distribution théorique prédite grâce aux relations K-S [Gourgues et al., 2000].

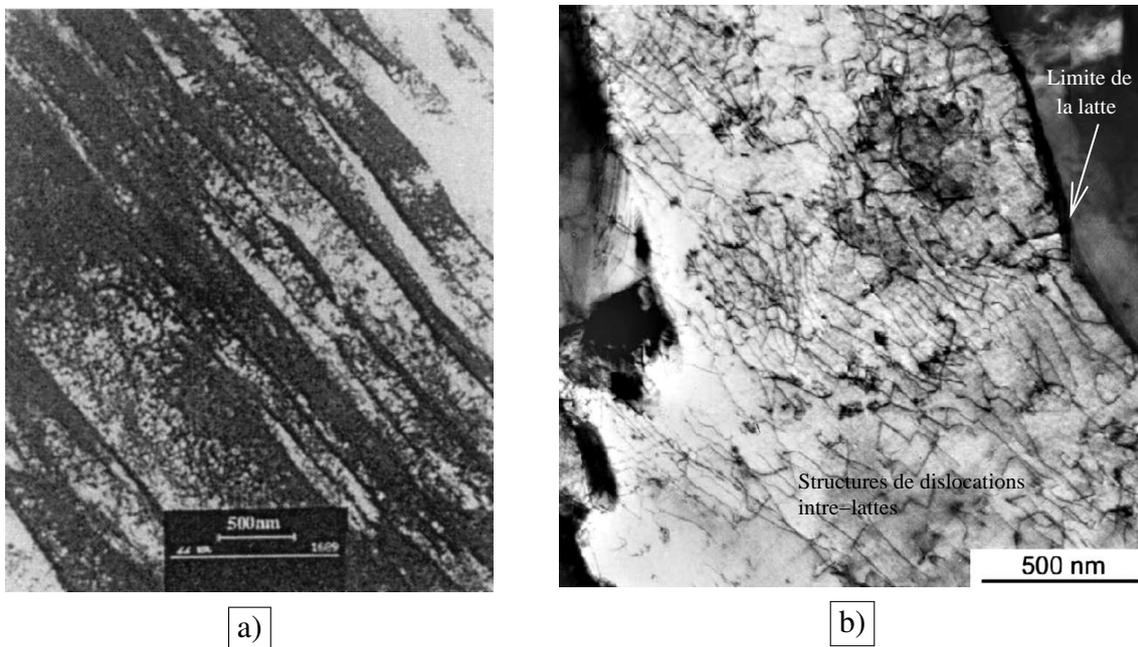


FIG. II.7 – Les lattes formant les paquets ferritiques : a) Observation d'un ensemble de lattes dans un acier ferritique [Morris et al., 2003], b) observation de la structure de dislocation à l'intérieur d'une latte pour l'acier 16MND5 [Karlik et al., 2003].

de nombreux déclenchements d'instabilités plastiques. On approxime fréquemment ce palier en l'aplatissant, c'est ce qui a été fait ici (figure II.8).

On observe une forte augmentation de la limite d'élasticité en fonction de la température pour les températures inférieures à 0°C. Cette forte dépendance à la température s'amenuise pour les températures positives [Tanguy, 2001]. La pente d'écrouissage montre une légère saturation de celui-ci pour les forts niveaux de déformation. Cette pente et son évolution avec la déformation n'évoluent pas beaucoup entre les différentes basses températures présentées.

b) Compression

Les essais de compression (figure II.9) menés par Tanguy [Tanguy, 2001] à température ambiante permettent sur un acier similaire issu d'une cuve différente, en première approximation, et par simplification, d'admettre un comportement symétrique, ne serait-ce que pour la limite d'élasticité. Une augmentation de l'écrouissage en compression semble observée, mais il n'en sera pas tenu compte. Les conditions d'essais de natures différentes ne permettent pas de tirer de conclusions à ce sujet.

II.1.3 Caractéristiques mécaniques des constituants

On ne considèrera dans toute cette étude que la sollicitation d'un volume élémentaire de matériau, dont les dimensions (de l'ordre de la centaine de micromètre, soit à peine plus que les plus grands MnS) sont bien trop petites pour que la probabilité d'y trouver un MnS soit significative. C'est pourquoi il ne sera pas tenu compte de ce constituant lors de la modélisation du comportement à froid du matériau et de l'étude de la rupture d'un volume élémentaire. En fait, les résultats obtenus en conclusion des présents travaux sont de nature à être utilisés pour l'étude de l'effet de la présence des MnS sur la rupture.

Le matériau est donc constitué principalement de ferrite dont une partie est chargée en cémentite. Devant le peu d'informations disponibles sur les mécanismes de plasticité de la bainite, c'est le comportement de ses deux principaux constituants, ferrite et cémentite qui fera l'objet de la recherche bibliographique. D'autant plus que le traitement de revenu, en rapprochant la microstructure d'une microstructure obtenue à l'équilibre thermodynamique permet de considérer que l'on a bien affaire à une ferrite chargée en cémentite.

a) Plasticité de la ferrite

La déformation des matériaux est classiquement décomposée en deux composantes, élastique (réversible) et anélastique.

La composante élastique, due à une distorsion réversible du réseau cristallin, est la première mise en jeu lors du chargement d'une structure quelconque.

La description de la composante anélastique de la déformation aux températures considérées passe par la prise en compte des deux principaux modes de déformation

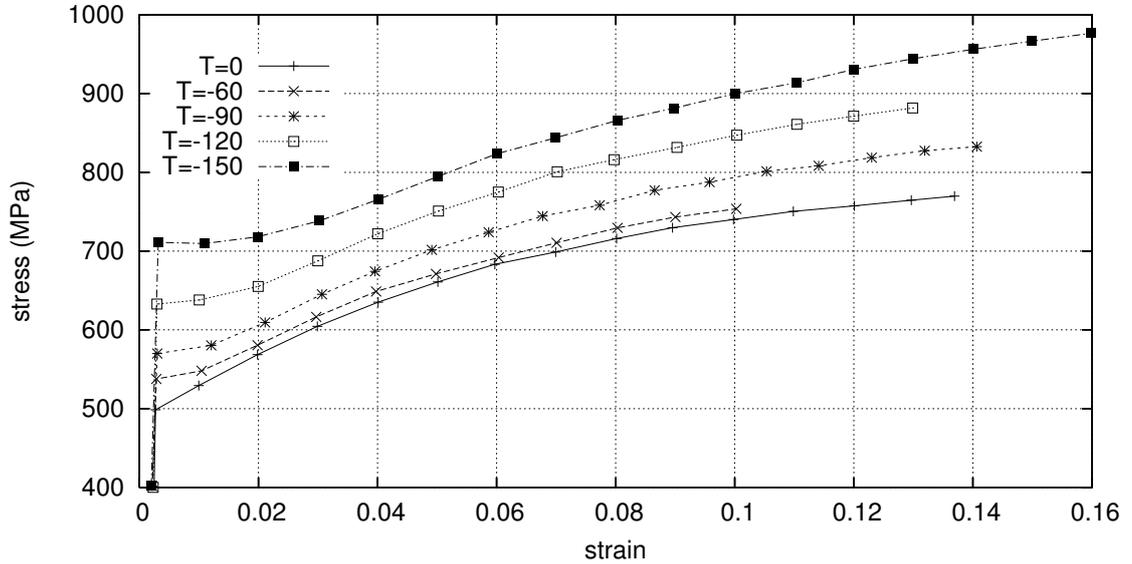


FIG. II.8 – Essais de traction uniaxiale (sens T) à différentes températures sur le matériau BQ12 [Renevey, 1998]. Les perturbations présentes en début de plasticité, dues aux instabilités de déformation, ont été éliminées.

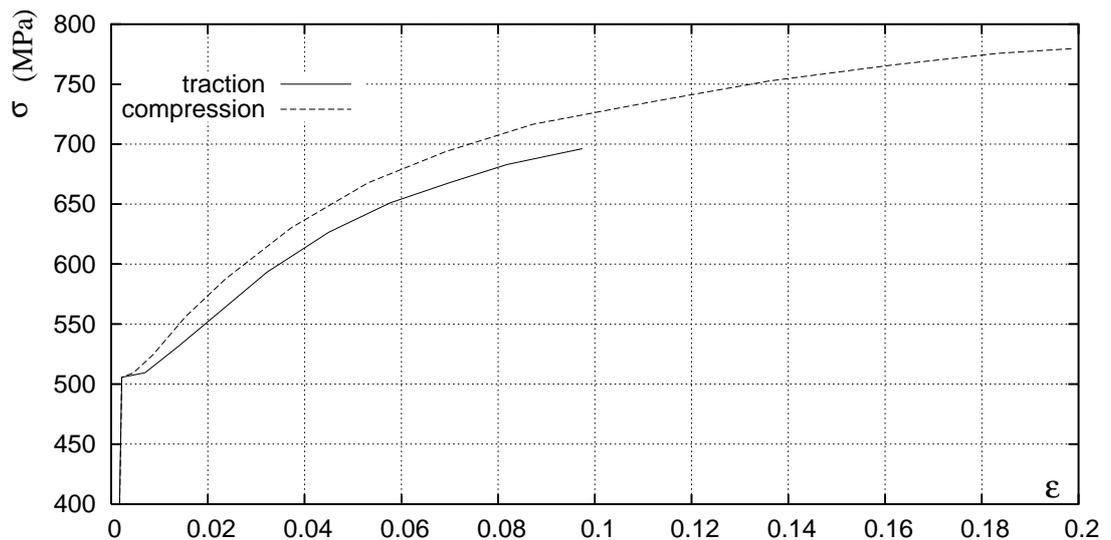


FIG. II.9 – Essais de traction uniaxiale et de compression (sens T) à température ambiante réalisés sur une nuance proche du matériau étudié [Tanguy, 2001].

anélastiques que sont le maillage et le glissement plastique. Le maillage peut être écarté, car celui-ci est favorisé par les grosses tailles de grain et les vitesses de sollicitation élevées, deux conditions qui ne seront *a priori* pas réunies pendant notre étude (le maillage est favorisé par les basses températures, mais il n'a pas été observé).

La déformation s'effectue donc de manière classique par glissement des plans cristallographiques denses les uns par rapport aux autres selon les directions denses du réseau cristallin. Ce glissement est rendu possible par l'intermédiaire du mouvement des dislocations qui autorise l'apparition du glissement plastique pour des cissons bien inférieures aux valeurs théoriques dans des réseaux cristallins parfaits [Français et al., 1993].

Dans le cas des matériaux de structure cubique centré, la direction de glissement est clairement identifiée comme étant la plus dense du réseau, soit la famille $\langle 111 \rangle$. Cette direction est associée à un plan de glissement qui peut être de différentes natures pour former un système de glissement :

- $\langle 111 \rangle \{110\}$, 12 systèmes : ces systèmes sont actifs aux basses comme aux hautes températures.
- $\langle 111 \rangle \{112\}$, 12 systèmes : ces systèmes sont considérés comme actifs plutôt aux hautes températures.
- $\langle 111 \rangle \{123\}$, 24 systèmes : considérés comme actifs aux très hautes températures (à partir de $T_{fusion}/2$).

Nous écarterons dans nos approches ces 24 derniers systèmes, les températures envisagées étant relativement basses. Certains auteurs ont également montré que leur "proximité" avec les plans de la famille précédente ($\langle 111 \rangle \{112\}$) ne rend pas leur activation indispensable pour bien décrire la plasticité de la ferrite [Hoc et al., 2003]. Franciosi écarte pour sa part complètement le glissement sur ces systèmes [Franciosi, 1984].

Plusieurs systèmes de glissement pourront donc avoir leur direction de glissement commune (figure II.10.a), ce qui donne lieu à l'apparition à la surface des échantillons monocristallins déformés de lignes de glissement sinueuses, dues au glissement dévié (figure II.10.b, d'après Jaoul [Jaoul, 1965]). A l'échelle macroscopique, le glissement peut donc apparaître comme non cristallographique, l'orientation moyenne des lignes observées se rapprochant du plan de cission maximale. Ce glissement non cristallographique est décrit en termes de "pencil-glide".

Pour les basses températures, les observations en microscopie à transmission mettent en évidence l'existence de dislocations de caractère essentiellement vis et de plus en plus rectilignes en abaissant la température [Obrtlík et al., 2006]. La dissociation du cœur des dislocations, qui les rend peu glissiles, provoque alors un glissement plastique par mécanisme de double décrochement (double kink, figure II.11), qui laisserait peu à peu place à des mécanismes de déformation plus proches de ce que l'on observe pour les CFC à plus haute température.

b) Observation de la plasticité de la ferrite

Taoka *et al.* ont effectué des tractions sur des monocristaux de fer à 3% de silicium dont les orientations étaient connues [Taoka et al., 1964]. Ces tractions à différentes températures (arrêtées pour une déformation équivalente comprise entre 0,5% et 1%, soit selon les auteurs au début de la partie plastique de la déformation) donnent des renseignements sur la nature des glissements pouvant être mis en jeu en fonction de la température (figure II.12).

L'aspect sinueux des lignes observées s'interprète en termes de glissement dévié de la composante vis des dislocations, ce phénomène étant facilité aux hautes températures. Notons la présence d'une rupture par clivage sur l'échantillon (A) à -196°C, dont la trace est clairement identifiée comme celle du plan (001). La déformation prenant place dans ces conditions est due au maclage, les conditions idéales étant réunies pour l'apparition de ce phénomène dans les monocristaux à très basses températures. Cette interprétation est largement explicitée dans les travaux de Franciosi [Franciosi, 1984].

c) Observation sur l'acier 16MND5

Des observations ont été faites à basses températures lors d'essais de traction interrompus sur un matériau bainitique proche de BQ12, ou bien lors d'observations sur des éprouvettes en *post-mortem* [Pesci, 2004]. Le glissement est observé dans la plupart des cas à proximité de la zone de rupture, et donc dans une zone où l'activité plastique a été plus intense qu'ailleurs. L'aspect sinueux encore plus prononcé que précédemment semble *a priori* exclure une identification des glissements actifs par leurs traces sur le plan d'observation. Une cartographie EBSD des orientations des lattes pourrait permettre d'identifier la nature des systèmes de glissement actifs ; connaissant l'orientation d'une latte, on peut déduire la projection d'un plan de glissement dans le plan d'observation, et donc procéder à une identification [Bugat, 2000].

Par ailleurs, l'utilisation d'un MET permet à Orbtlik *et al.* [Orbtlik et al., 2006] d'observer les structures de dislocations en cours de déformation à 0°C et -196°C. Ces travaux mettent ainsi en évidence la présence de deux régimes différents de déformation : le premier, valable aux plus hautes températures, qualifié de régime "athermique", où la déformation par glissement plastique possède des caractéristiques proches de la déformation des métaux de structure CFC. Pour les très basses températures (-196°C), le régime de déformation est qualifié de "thermique", avec une déformation observée par mécanisme de "double-kink". Ce mécanisme de double-décrochement s'explique par la forte dissociation du coeur des dislocations. L'activation des systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{ 112 \}$, si elle est observée à 0°C, ne l'est pas à -196°C pour de faibles déformations, ce qui semble indiquer que les systèmes $\langle 111 \rangle \{ 110 \}$ sont les premiers activés.

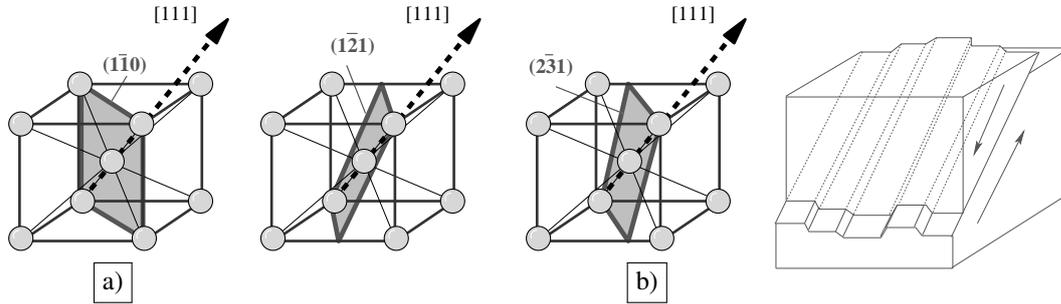


FIG. II.10 – Mécanismes de déformation des matériaux de structure cubique centrée : a) Trois systèmes de glissement de natures différentes ayant une direction commune, b) Le glissement dévié.

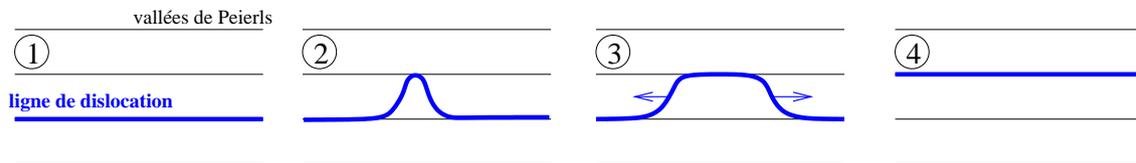


FIG. II.11 – Le mécanisme de mouvement par double décrochement d'un segment de dislocation vis. Ce mécanisme est le mécanisme de déformation aux basses températures pour les CC.

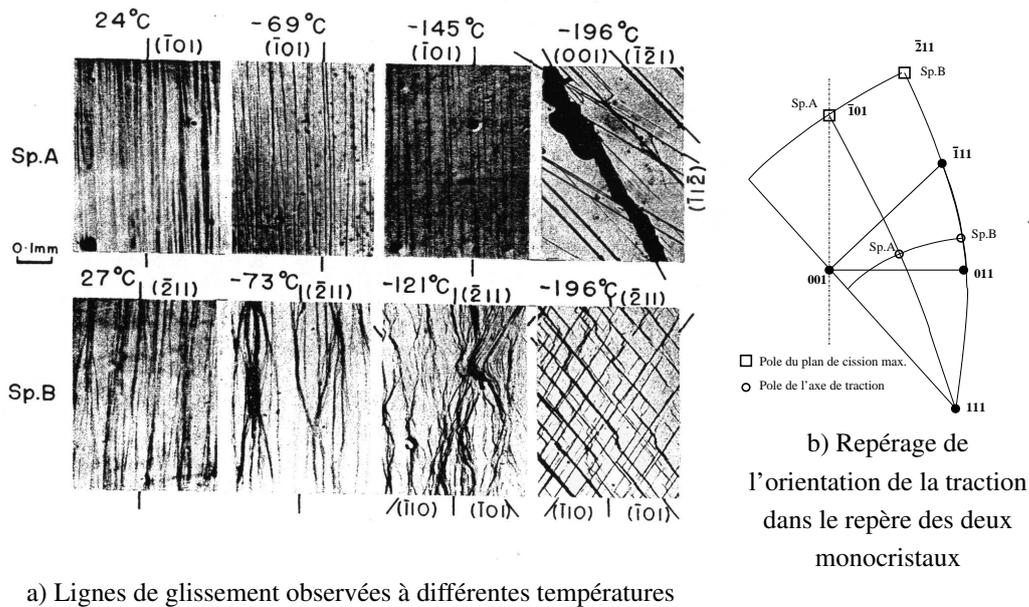


FIG. II.12 – Observations des glissements lors de traction sur monocristaux [Taoka et al., 1964].

d) Dépendance de la cission critique en température

Les travaux de Taoka *et al.*, montrent la dépendance de la cission résolue critique en fonction de la température (figure II.13.a), et ce en différenciant bien la cission critique des systèmes de glissement de plans {110} et {112}. Cette dépendance est confirmée par d'autres travaux comme ceux de Keh *et al.* [Keh et Nakada, 1967].

Bien évidemment, la composition différente de la ferrite présente dans l'acier 16MND5 par rapport aux échantillons monocristallins utilisés (fer pur et fer à 3% de Si), notamment au niveau des éléments d'addition, et le fait qu'elle soit chargée en cémentite, y compris à des fractions volumiques très faibles pour certaines zones, exclut de généraliser les observations précédentes au cas étudié.

Une modélisation approfondie devrait prendre en compte l'asymétrie de cission critique des systèmes de la famille {112}. En effet la résistance au glissement des dislocations dans le sens favorisant le maclage sera plus faible que dans le sens inverse. Néanmoins, ce phénomène, observé dans les travaux de Keh [Keh et Nakada, 1968] et confirmé par des modélisations atomistiques des structures CC à basses températures [Lee et al., 1999] ne sera pas pris en compte.

e) Ecouissage dans la ferrite

La figure II.13.b est tirée des travaux de Quesnel *et al.* [Quesnel et al., 1975], dans lesquels des tractions sont effectuées sur des monocristaux préalablement orientés pour le glissement simple selon $\langle 111 \rangle \{110\}$. L'écrouissage observé dans ce cas est donc de l'auto-écrouissage. Sa pente ne dépend pas de la température, excepté à très basse température, où le phénomène des bandes de Piobert-Lüders est observé. Ces résultats ne permettent pas de tirer de conclusions sur l'écrouissage latent dans ces monocristaux. Là encore, la modélisation envisagée pourra prendre en compte différentes modélisations de l'écrouissage afin de rendre compte de ce type de phénomènes.

Les courbes de la figure II.14 montrent bien l'importance de l'activation d'un ou plusieurs systèmes. Les monocristaux repérés A, B et C, orientés pour le glissement multiple, présentent un écouissage parabolique, alors que les autres cristaux, orientés pour le glissement simple subissent un écouissage classiquement décrit en plasticité par trois stades (orientation G par exemple). Le glissement est d'abord facile (Stade I), aucun obstacle ne s'opposant à la propagation des dislocations. Ensuite pour le stade II, l'écrouissage est linéaire et correspond au blocage des dislocations autour des obstacles jusqu'à formation de sous-structures. Enfin le dernier stade (stade III), d'allure parabolique, qui semble présenter une saturation de l'écrouissage, est dû à divers processus d'annihilation ou de recombinaison des dislocations. Les cristaux orientés pour le glissement multiple ne présentent pas le premier stade, le blocage des dislocations intervenant dès le début de la déformation entre les différents systèmes de glissement.

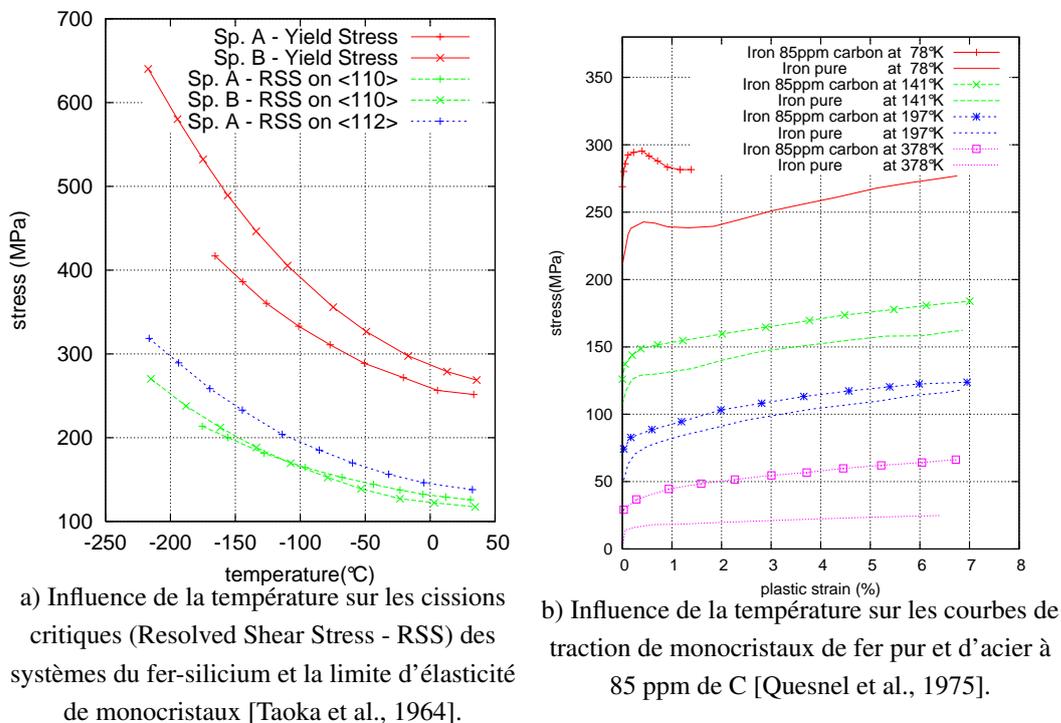


FIG. II.13 – Evolution des grandeurs caractéristiques de la déformation plastique en fonction de la température.

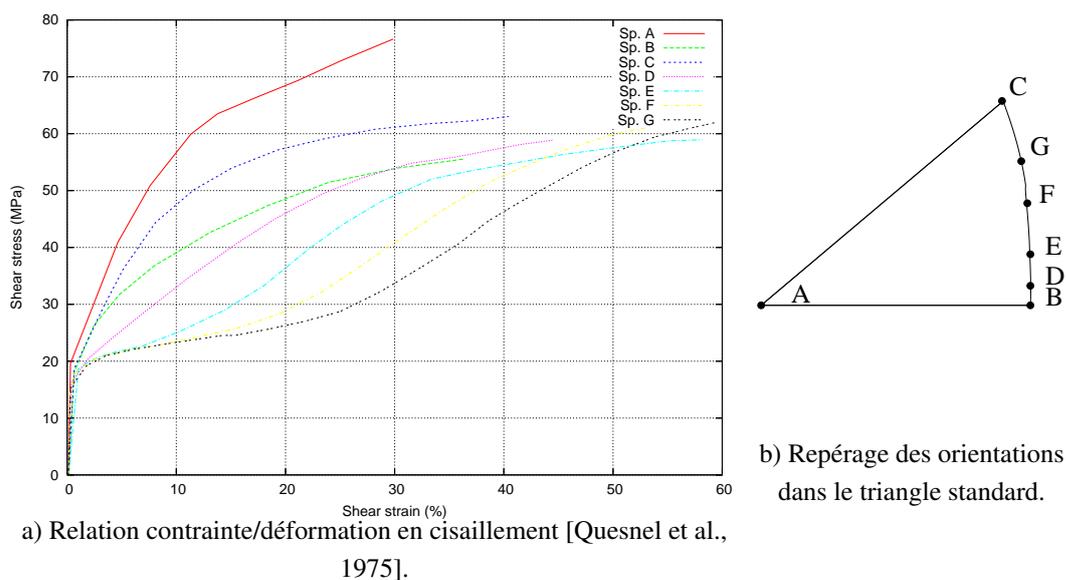


FIG. II.14 – Effet de l'orientation sur le rapport entre cisson et glissement.

f) Comportement de la cémentite

La connaissance des propriétés mécaniques de la cémentite est bien évidemment une donnée d'entrée très importante des modélisations envisagées. Présente sous forme d'inclusions dans l'acier, seule une approche inverse pourrait permettre d'estimer ses propriétés. On ne connaît pas précisément la fraction volumique de cémentite de l'acier de cuve, ce qui rend cette estimation très hasardeuse.

Des échantillons massifs de cémentite ont été synthétisés par diverses équipes sous formes de lames minces [Mizubayashi et al., 1999] puis sous forme d'échantillons massifs [Umemoto et al., 2001b]. La figure II.15 montre deux micrographies de tels échantillons.

Diverses propriétés mécaniques ont ensuite été mesurées [Umemoto et al., 2001a] sur ces échantillons, en faisant varier la teneur de certains éléments d'addition. Ces résultats sont reportés à la figure II.16.

Le module d'Young déterminé sur ces échantillons est très proche de celui des aciers. La dureté quant à elle possède une valeur très élevée ($\approx 10 \text{ GPa}$), qui ne peut d'ailleurs trouver aucune valeur équivalente de limite d'élasticité dans les abaques de conversion. Ces diverses valeurs pourront être utilisées lors de la modélisation de la cémentite de l'acier de cuve, bien que là encore, sa composition ne soit pas connue précisément. On pourra en tous cas considérer qu'elle reste élastique.

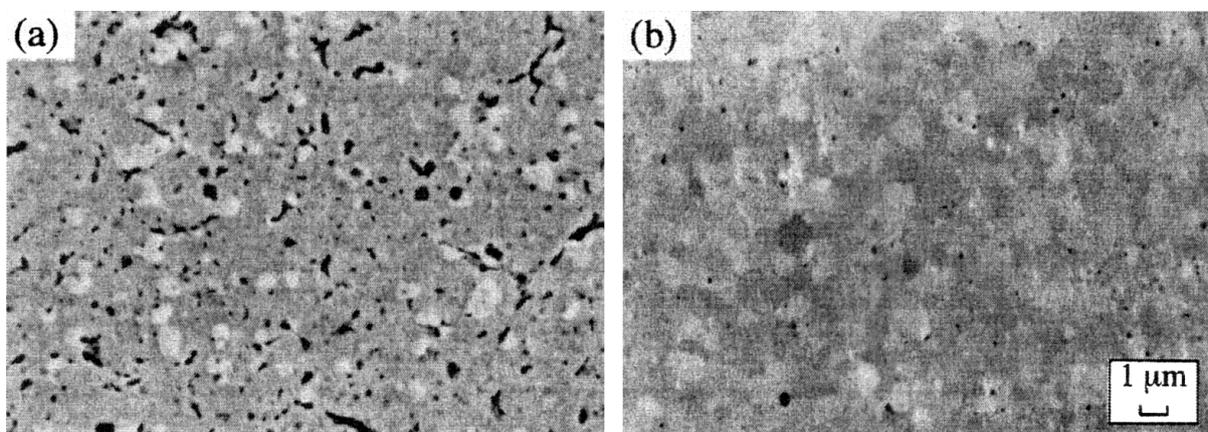


FIG. II.15 – Observations MEB d'échantillons de cémentite [Umemoto et al., 2001b]. (a) Fe_3C
(b) $(Fe_{0,8}Cr_{0,2})_3C$

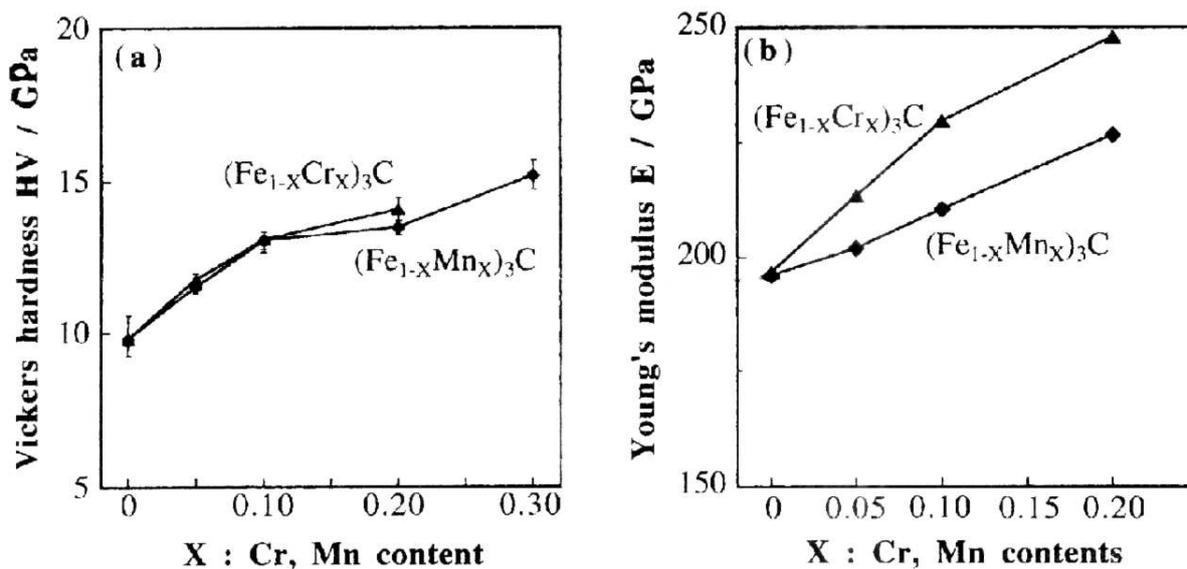


FIG. II.16 – Propriétés mécaniques à température ambiante en fonction des taux d'éléments d'addition. [Umemoto et al., 2001a]

II.2 Contribution à la caractérisation de la microstructure

II.2.1 Répartition des carbures

Une première forme d'hétérogénéité est observable entre la ferrite, pauvre en carbures, et ce que l'on qualifiera d'amas de carbures, constitués d'une ferrite parsemée de carbures (figures II.19 à II.17). L'échelle de représentation de la figure II.18 permet de bien rendre compte de la morphologie générale du matériau, qui, sauf cas particulier (présence de sulfures de manganèse, par exemple), est globalement bien décrite par ces tailles de surfaces d'observation (de l'ordre de la centaine de grains).

On choisira ici de distinguer la cémentite qui se situe aux anciens joints de grains, ainsi qu'aux interfaces entre paquets de lattes ferritiques, de celle qui se situe sous forme d'amas à l'intérieur de ces mêmes paquets ferritiques (figure II.20).

Cet aspect de répartition des carbures dans la matrice ferritique est primordial et fait l'objet de nombreux commentaires dans le chapitre IV.

La fraction volumique exacte de cémentite n'a pu être trouvée dans aucun des travaux consultés sur l'acier 16MND5. Seule une fraction volumique estimée à 2,6% a été obtenue pour une bainite à 0,17% de carbone étudiée par Fisher *et al.* [Fisher et Gurland, 1981]. En faisant l'hypothèse que les traitements subis par le matériau mènent à une microstructure à l'équilibre du diagramme fer-carbone, et que ferrite et cémentite sont à l'équilibre, on obtient :

$$f_m(Fe_3C) = (f_m(C)_{16MND5} - f_m(C)_{Fe\alpha}) \cdot \left(1 + 3 \cdot \frac{m_{Fe}}{m_C}\right) \quad (2.3)$$

$$f_m(Fe_3C) = (0,159 - 0,022) \cdot \left(1 + 3 \cdot \frac{55,85}{12}\right) = 2,05\% \quad (2.4)$$

Sachant que les masses volumiques de la ferrite et de la cémentite sont très proches, on peut estimer une fraction volumique maximale d'environ 2%. Cette approximation peut paraître grossière pour une bainite qui n'est pas à proprement parlé une structure d'équilibre. Toutefois le long traitement de revenu favorise certainement un rapprochement de la composition finale de l'acier 16MND5 de celle de l'état à l'équilibre. Ainsi, c'est plutôt la présence d'éléments d'addition qui fera varier la fraction volumique de cémentite.

En l'absence de données plus précises, cette valeur pourra en tous les cas être considérée comme une valeur maximale et raisonnable, surtout si on la compare aux données de Fisher. Ce manque de données s'explique par les grandes difficultés expérimentales rencontrées pour une mesure de la fraction de cémentite. L'analyse d'images classiquement utilisée pour quantifier les fractions volumiques des phases, pose ici de nombreux problèmes.

Tout d'abord, elle nécessite des images de résolution suffisante pour de petits précipités tels que les carbures (typiquement MEB-FEG, voire études de répliques au MET [Ortner et al., 2005]). Ensuite, la grande dureté des carbures fait qu'une préparation classique d'échantillons métalliques (mécanique ou électrolytique) ne permet pas de s'assurer que le

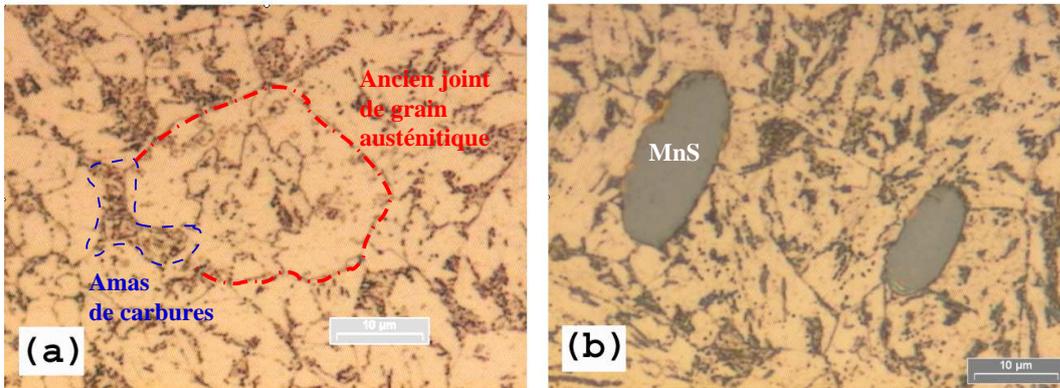


FIG. II.17 – Observation optique de la microstructure de l'acier 16MND5, après attaque au nital à 2% (a), observation autour de deux inclusions de sulfure de manganèse (b).

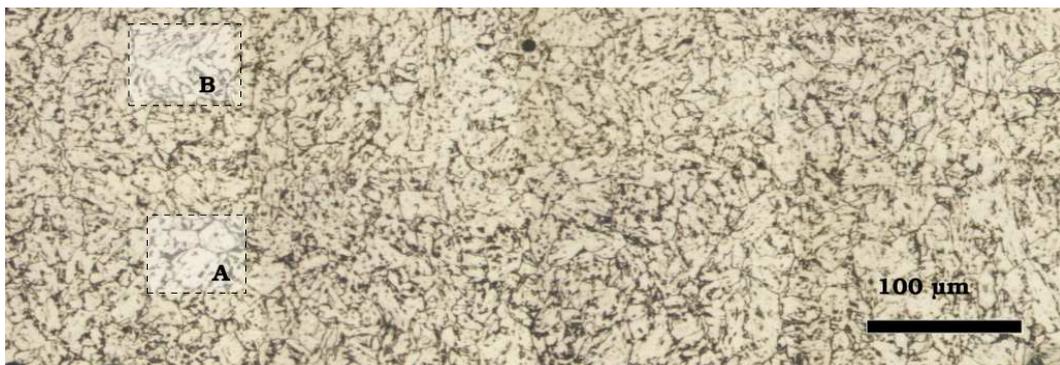


FIG. II.18 – Observation optique en plan large de la microstructure de l'acier 16MND5, après attaque au nital à 2%.

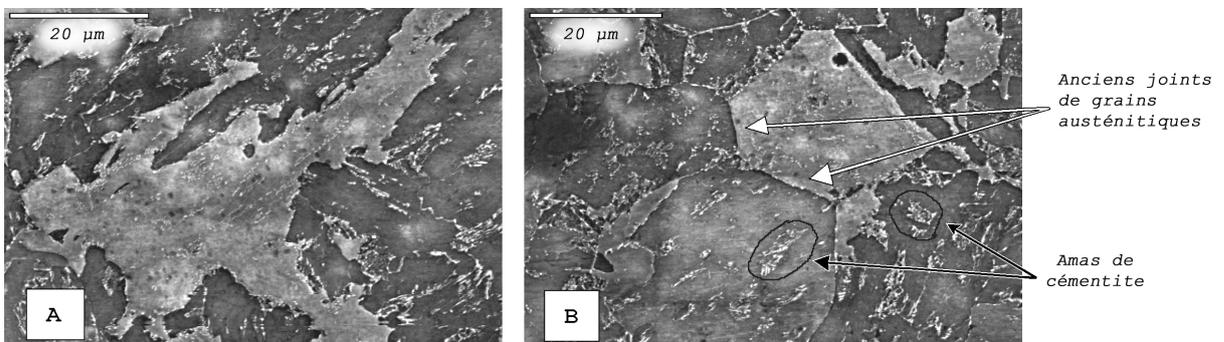


FIG. II.19 – Observation au Microscope Électronique à Balayage (MEB) de détails de la microstructure de l'acier 16MND5. Les deux zones A et B sont les mêmes que celles des observations reportées aux figures II.18 et II.21.

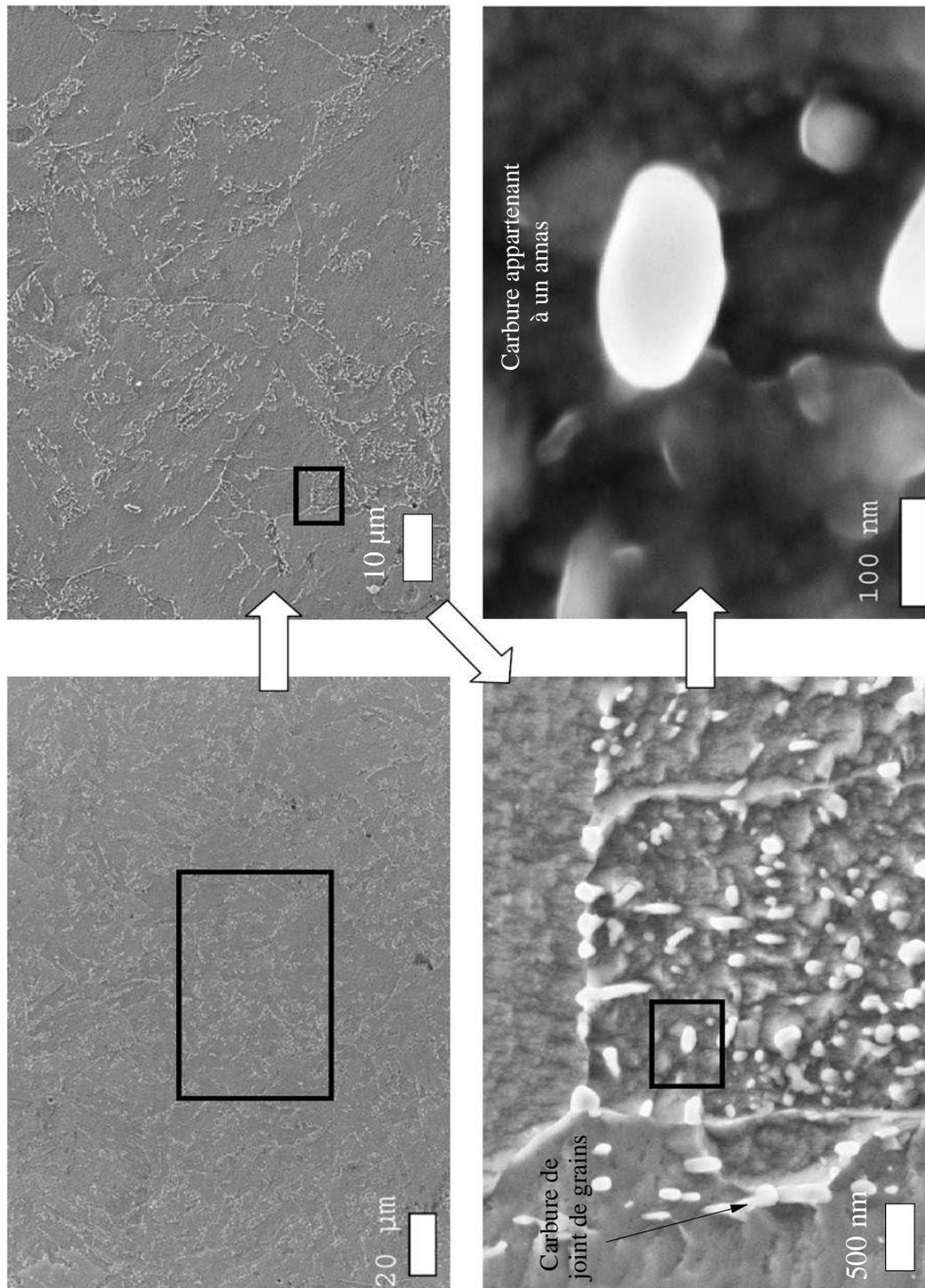


FIG. II.20 – Carbures situés dans la ferrite observés au MEB-FEG (Field Emission Gun) d'EDF (Site des Renardières).

taux surfacique d'inclusions observé à l'image est représentatif de la fraction volumique. Aux échelles d'observation, la planéité "relative" nécessaire à la démarche n'est plus respectée. Le polissage attaque préférentiellement la matrice ferritique. Il est donc fréquent d'observer plus de carbures que ce que l'on obtiendrait par une "coupe" du matériau ce qui fausse la mesure de fraction surfacique, et donc la détermination de fraction volumique. Néanmoins la répartition des tailles mesurée reste correcte. Un dénombrement des carbures par classes de tailles a été effectué dans les travaux de Lee *et al.* [Lee et al., 2002]. Les auteurs affirment que la majorité des carbures, de taille inférieure à $0,05 \mu\text{m}$, n'ont pas été pris en compte car trop petits pour être mesurés.

II.2.2 Morphologie de la phase ferritique

a) Morphologie en paquets de lattes

Si les observations MET évoquées au paragraphe II.1.1.c) révèlent une certaine hétérogénéité des structures de dislocations aux frontières des lattes, les modélisations envisagées ne permettent pas de rendre compte des hétérogénéités à de si faibles échelles. On les traduira éventuellement par un durcissement global du comportement du paquet de lattes. On justifie ainsi la représentation de la microstructure prenant le paquet de lattes ferritiques de même orientation comme entité de base. D'autre part, cette idée semble se justifier à l'échelle d'observation des paquets : la figure II.21 illustre ce propos.

De la même façon, Hausild [Hausild, 2002] met en évidence la distinction qui doit être faite entre les paquets cristallographiques et morphologiques. Les paquets morphologiques représentent les paquets apparents en microscopie optique ou électronique qui peuvent parfois être confondus avec les anciens grains austénitiques, et les paquets cristallographiques ceux que l'on peut distinguer par EBSD. L'auteur constate un chevauchement des deux morphologies, deux paquets morphologiques qui apparaissent comme distincts pouvant être indissociables cristallographiquement, et inversement. Cette observation de surface peut être étendue au volume étant donné la nature isotrope de la microstructure.

L'observation conjointe d'une même zone d'un échantillon par EBSD et par microscopie optique (figure II.21) permet toutefois de mettre en valeur, plutôt qu'un chevauchement, le fait qu'un paquet morphologique peut être composé de plusieurs paquets cristallographiques.

Par ailleurs, les paquets de lattes sont caractérisés par une très faible désorientation entre celles-ci qui apparaissent comme une légère variation de la coloration au sein du paquet. La figure II.22 permet d'observer que ces désorientations très faibles ne sont pas significatives.

b) Texture cristallographique

L'acier ne présente pas de texture cristallographique marquée ce qui s'explique par les traitements qu'il subit : l'austénitisation lui confère une structure équiaxe et une texture

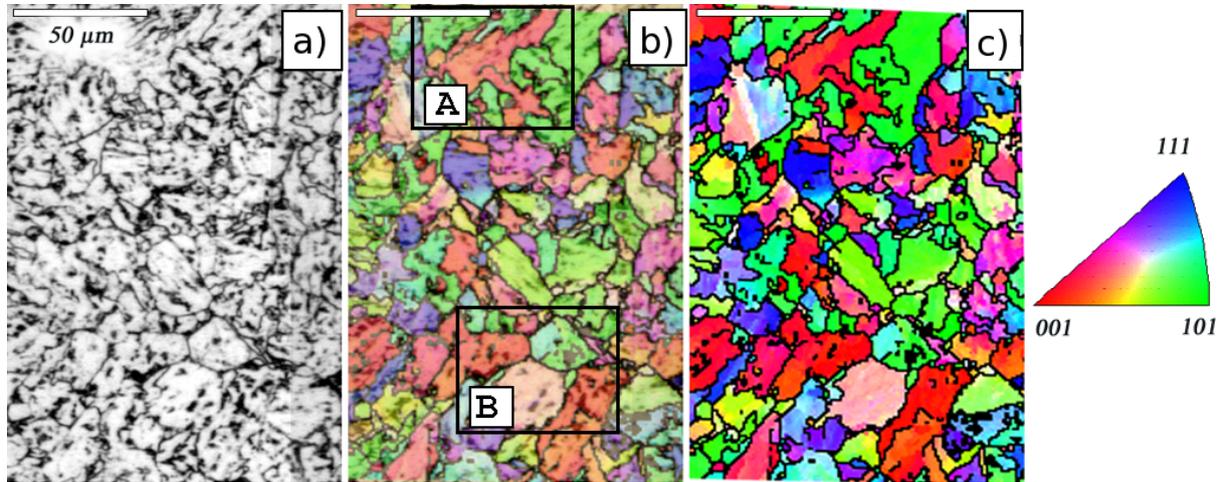


FIG. II.21 – Deux observations d’un même échantillon, au microscope optique après attaque au Nital (a) et par technique EBSD (c). L’image du centre est une superposition des deux clichés (b).

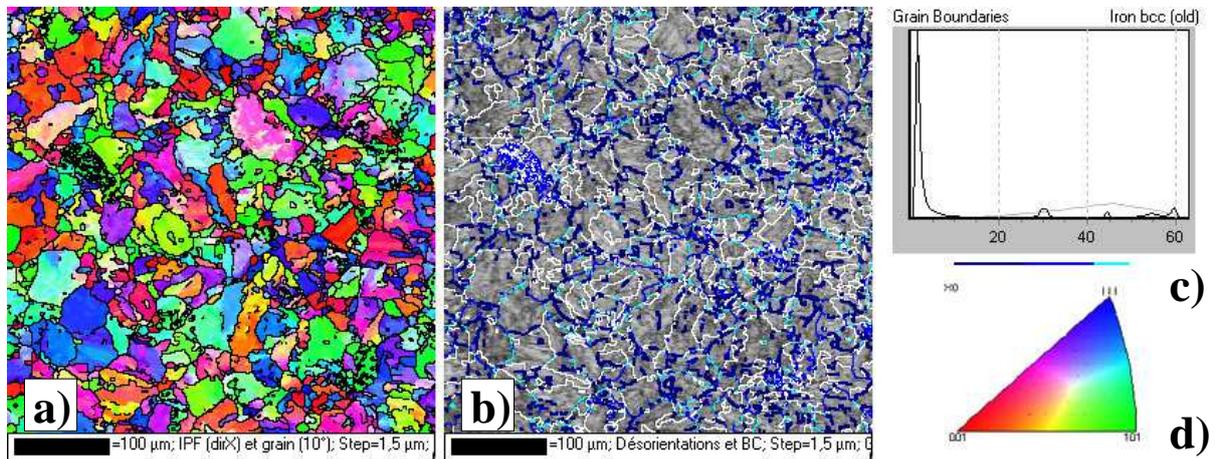


FIG. II.22 – Cartographie EBSD de l’acier 16MND5. Deux post-traitements de l’image ont été utilisés. a) Cartographie avec visualisation IPF (Inverse Pole Figure) standard des orientations (les désorientations supérieures à 10° sont affichées en noir - [légende d]) . b) Désorientations entre les grains et les lattes pour la même zone observée - [légende c)].

cristallographique isotrope. Cette isotropie de texture n'est pas perturbée mais exacerbée par la croissance des nombreux variants de ferrite. Une représentation de la texture déduite d'une cartographie EBSD étendue ($750 \times 600 \mu\text{m}^2$), confirme cette hypothèse (voir figure II.23).

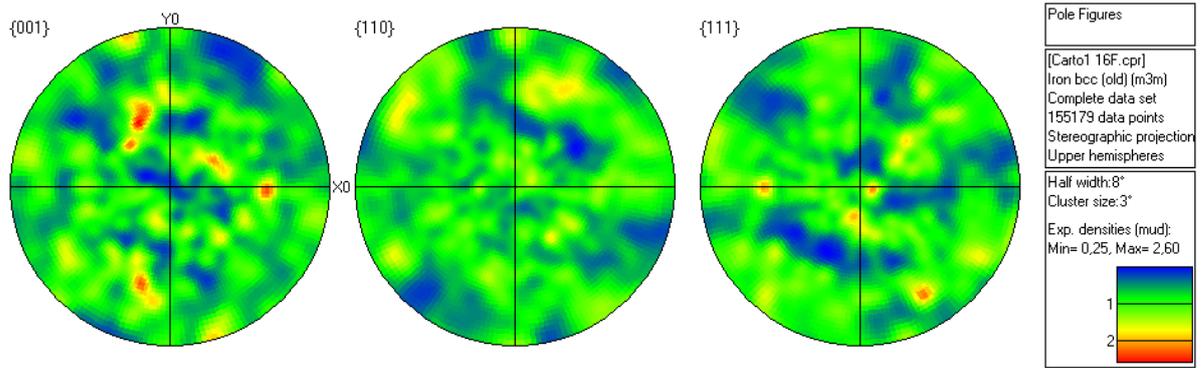


FIG. II.23 – Texture cristallographique déduite en post-traitement d'une cartographie EBSD de l'acier 16MND5.

II.3 Représentation synthétique de la microstructure

Les modélisations du comportement de l'acier de cuve mises en place dans la suite des travaux prendront en compte toutes les caractéristiques morphologiques présentées précédemment, exception faite des aspects de relation d'orientation entre paquets de lattes issues d'un même grain austénitique. Les inclusions de sulfure de manganèse ne sont pas représentées. Les aspects pris en compte auront en effet une forte influence sur les champs locaux se développant en cours de déformation, comme le montreront les différentes approches expérimentales du chapitre suivant. La figure II.24 présente une synthèse de ces observations. Une représentation valide de la microstructure devra tenter d'approcher au mieux cette morphologie.

Finalement, il semble possible de décrire cette microstructure comme une microstructure classique en grains de forme régulière, puisque l'on n'observe pas de formes complexes des paquets de lattes lors des examens de microstructure. La question de la prise en compte de la cémentite dans la modélisation reste ouverte. Raphaël Pesci [Pesci, 2004] l'avait incluse dans sa modélisation à double niveau d'homogénéisation, grâce à une approche matrice-inclusion de type Mori-Tanaka. Les diverses observations sur le rôle de la morphologie en amas de cémentite qui seront faites au chapitre suivant montreront la nécessité de bien réfléchir à cette représentation.

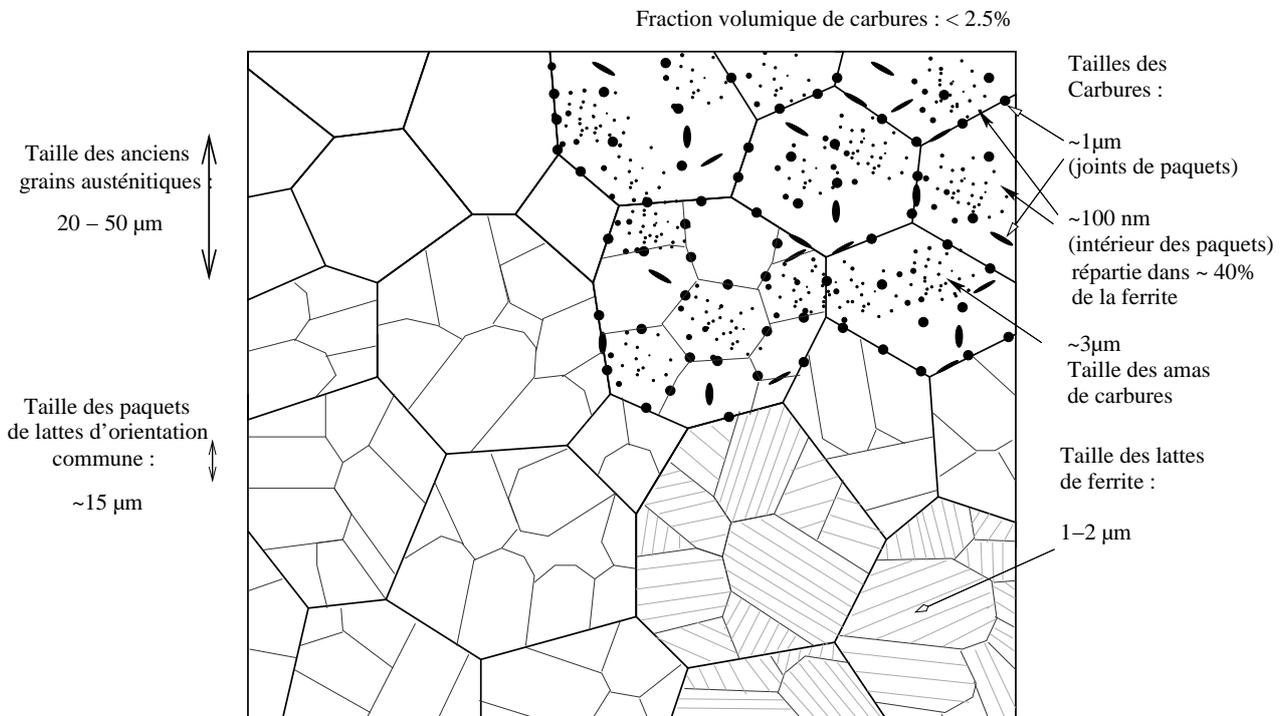


FIG. II.24 – Représentation synthétique des dimensions caractéristiques de la microstructure et de sa morphologie.

En conclusion

- *Le matériau étudié, l'acier de cuve 16MND5 BQ12 possède une microstructure de bainite revenue, composée majoritairement d'une matrice ferritique renforcée de carbures, répartis principalement en amas.*
 - *Les deux constituants principaux, ferrite et cémentite, possèdent des comportements mécaniques très différents aux basses températures. Le comportement macroscopique est celui d'une ferrite renforcée par la présence d'inclusions dures.*
 - *Les différentes observations expérimentales ne montrent pas de morphologie particulière des paquets de lattes ferritiques, si bien qu'on les considérera comme l'entité cristallographique principale, par analogie avec les grains des microstructures "classiques" des matériaux polycristallins.*
 - *Aucune texture cristallographique marquée n'a été observée. Par ailleurs, les travaux précédents ne mettent pas en évidence de texture morphologique.*
 - *Une représentation synthétique de la microstructure est proposée, base d'une compréhension des mécanismes de déformation et d'une modélisation de type micromécanique du comportement et de la rupture.*
-

Bibliographie

- [Bugat, 2000] BUGAT S. (2000). *Comportement et endommagement des aciers austéno-ferritiques vieillis : une approche micromécanique*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Carassou, 1999] CARASSOU S. (1999). *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : Rçae de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Fisher et Gurland, 1981] FISHER J.R. ET GURLAND J. (1981). *Void nucleation in spheroidized carbon steels - Part I. : Experimental*. Met. Sci., vol. 15, pp 185–192.
- [Français et al., 1993] FRANÇAIS D., PINEAU A., ET ZAOUÏ A. (1993). *Comportement mécanique des matériaux*. Editions Hermès.
- [Franciosi, 1984] FRANCIOSI P. (1984). *Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi-statique*. Thèse de Doctorat, Université de Paris-Nord.
- [Gourgues et al., 2000] GOURGUES A.F., FLOWER H.M., ET LINDLEY T.C (2000). *Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures*. Mater. Sci. Technol., vol. 16, pp 26–40.
- [Hausild, 2002] HAUSILD P. (2002). *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Hoc et al., 2003] HOC T., CRÉPIN J., GELEBART L., ET ZAOUÏ A. (2003). *A procedure for identifying the plastic behavior of single crystals from the local response of polycrystals*. Acta Mater., vol. 51, pp 5477–5488.
- [Jaoul, 1965] JAOUÏ B. (1965). *Etude de la plasticité et application aux métaux*. Editions Dunod.
- [Karlik et al., 2003] KARLIK M., NEDBAL I., ET SIEGL J. (2003). *Microstructure of a reactor pressure vessel close to the zones of ductile tearing and cleavage*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 357, pp 423–428.
- [Keh et Nakada, 1967] KEH A.S. ET NAKADA Y. (1967). *Plasticity of iron single crystals*. Canadian J. of Phys., vol. 45, pp 1101–1120.
- [Keh et Nakada, 1968] KEH A.S. ET NAKADA Y. (1968). *Yielding, plastic flow and dislocation substructure in iron single crystals*. Trans. JIM, vol. 9, pp 867–884.
- [Kelly, 1992] KELLY P.M. (1992). *Crystallography of lath martensite in steels*. Acta Metall., vol. 40, pp 1519–1530.
- [Lambert-Perlade, 2001] LAMBERT-PERLADE A. (2001). *Rupture par clivage de microstructures d'aciers bainitiques obtenues en conditions de soudage*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Lee et al., 2002] LEE S., KIM S., HWANG B., LEE B.S., ET LEE C.G. (2002). *Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel*. Acta Mater., vol. 50, pp 4755–4762.
- [Lee et al., 1999] LEE Y.J., SUBHASH G., ET RAVICHANDRAN G. (1999). *Constitutive modeling of textured body-centered-cubic (BCC) polycrystals*. Int. J. Plasticity, vol. 15, pp 625–645.
- [Mizubayashi et al., 1999] MIZUBAYASHI H., LI S.J., YUMOTO H., ET SHIMOTOMAI M. (1999). *Young's modulus of single phase cementite*. Scripta Mater., vol. 40, pp 773–777.

- [Morris et al., 2003] MORRIS J.W., LEE C.S., ET GUO Z. (2003). *The nature and consequences of coherent transformations in steel*. ISIJ Int., vol. 43, pp 410–419.
- [Obtlik et al., 2006] OBRTLİK K., ROBERTSON C.F., ET MARINI B. (2006). *Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension*. J. of Nucl. Mat., vol. 342, pp 35–41.
- [Ortner et al., 2005] ORTNER S.R., DUFF J., ET BEARDSMORE D.W. (2005). *Characterisation of Euro A Reference steel for application of EOH model of brittle fracture - Technical report SA/EIG/15234/R003 - Project PERFECT*. SERCO Assurance.
- [Pesci, 2004] PESCI R. (2004). *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Quesnel et al., 1975] QUESNEL D.J., SATO A., ET M.MESHII (1975). *Solution softening and hardening in the iron-carbon system*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 18, pp 199–208.
- [Renevey, 1998] RENEVEY S. (1998). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay - CEA.
- [Takahashi, 2004] TAKAHASHI M. (2004). *Recent progress : kinetics of the bainite transformation in steels*. Current Opinion in Solid State and Materials Science, vol. 8, pp 213–217.
- [Tanguy, 2001] TANGUY B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Taoka et al., 1964] TAOKA T., TAKEUCHI S., ET FURUBAYASHI E. (1964). *Slip systems and their critical shear stress in 3% silicon iron*. J. Phys. Soc. Japan, vol. 19, pp 701–711.
- [Umemoto et al., 2001a] UMEMOTO M., LIU Z.G., MASUYAMA K., ET TSUSHIYA K. (2001a). *Influence of alloy additions on production and properties of bulk cementite*. Scripta Mater., vol. 45, pp 391–397.
- [Umemoto et al., 2001b] UMEMOTO M., LIU Z.G., MASUYAMA K., ET TSUSHIYA K. (2001b). *Production of bulk cementite and its characterization*. Metall. and Mater. Trans. A, Phys. Metall. Mater. Science, vol. 32, pp 2127–2131.

Chapitre -III-

Hétérogénéités mécaniques à basse température

Sommaire

III.1	Aspects expérimentaux	44
III.1.1	Machine de traction <i>in-situ</i>	44
III.1.2	Description des essais réalisés	47
III.1.3	Analyse de contraintes par DRX	48
III.2	Observations des hétérogénéités à basses températures	52
III.2.1	Observations réalisées <i>in-situ</i>	52
III.2.2	Observations au MEB-FEG d'éprouvettes <i>post-mortem</i>	55
III.2.3	Effets "composite" et "polycristal"	58
III.3	Hétérogénéités de contraintes quantifiées par DRX	59
III.3.1	Répartition des contraintes entre les phases : essais de traction <i>in-situ</i> et DRX	59
III.3.2	Hétérogénéités au sein de la phase ferritique : oscillations et blocs de cristaux	64
III.4	Discussion	69
	Bibliographie	72

Introduction

L'aspect expérimental de ces travaux, abordé notamment dans ce chapitre, nécessite l'utilisation de diverses techniques expérimentales de caractérisation. La première partie de ce chapitre présente succinctement les équipements, les différentes méthodes utilisées, ainsi que les résultats à attendre de leur utilisation.

*Ensuite, la seconde partie expose la caractérisation qualitative des hétérogénéités mécaniques qui apparaissent au sein du matériau, et de ses différents constituants en cours de sollicitation. Les techniques classiques d'imagerie sont mises en oeuvre *in-situ* et permettent de mettre en évidence deux effets distincts : celui des amas de cémentite et celui de l'aspect polycristallin de la matrice ferritique.*

Les méthodes de diffraction des rayons X sont finalement utilisées pour consolider la caractérisation de ces deux effets en permettant de quantifier les hétérogénéités de contraintes qui leur sont propres. Ainsi, elles démontrent l'importance de leur prise en compte.

III.1 Aspects expérimentaux

III.1.1 Machine de traction *in-situ*

a) Présentation

Une machine de traction aux dimensions réduites a été acquise conjointement par l'ENSAM de Metz et le Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux (LPMM) auprès de la société Kammrath & Weiss (figure III.1). Son principal intérêt est sa taille réduite qui permet de l'utiliser *in-situ*. Elle permet ainsi d'effectuer un essai de traction sur des éprouvettes de petite taille, à l'intérieur même d'autres appareils de mesure. Elle est équipée d'un capteur de force qui permet de déterminer la contrainte nominale en cours d'essai, ainsi que d'un capteur de déplacement des mors. Celui-ci ne permet pas une détermination précise de la déformation de la zone utile de l'éprouvette, notamment lorsque l'on utilise des échantillons de forme complexe, ce qui conduira à utiliser aussi une machine de traction conventionnelle pour certains essais.

La machine est aussi pourvue d'un système de cryogénie et de régulation thermique qui permet de conduire les essais à diverses températures [-150°C ; 300°C]. Dans notre cas, les essais sont menés à basse température. Le refroidissement est réalisé par un cooler alimenté en azote liquide et se situant sous l'échantillon. La présence de ce cooler ainsi que

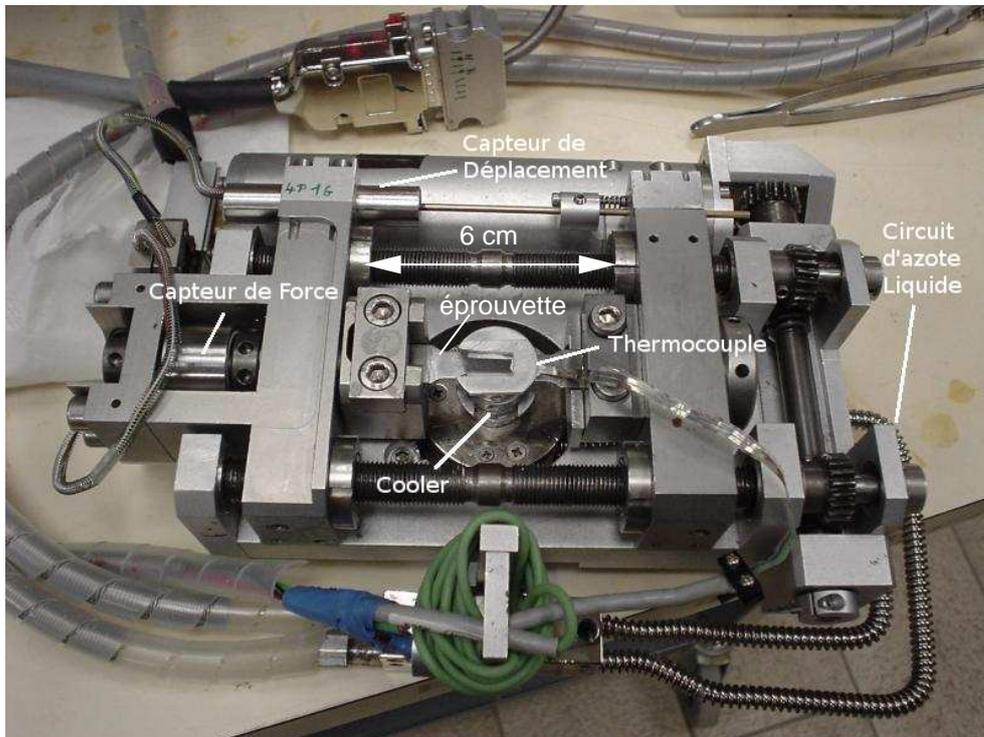


FIG. III.1 – Machine de traction *in-situ* préparée pour un essai à froid de DRX.

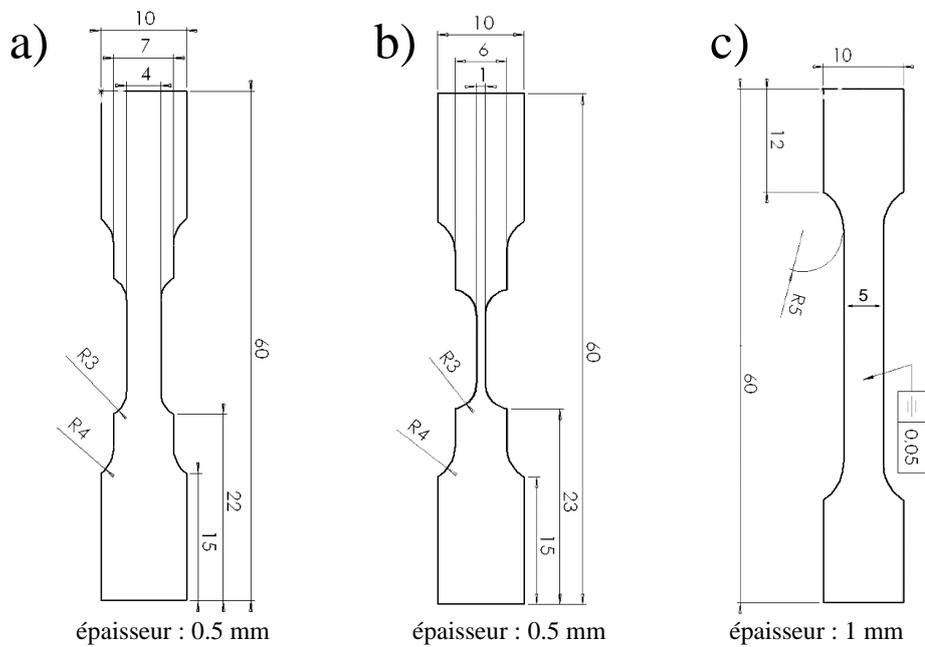


FIG. III.2 – Les différents types d'éprouvettes : a) essais de Diffraction des Rayons X (éprouvettes type A), b) essais de traction *in-situ* après EBSD (éprouvettes type B), c) essais sur machine conventionnelle (éprouvettes type C).

l'encombrement général rendent difficile l'utilisation d'un extensomètre qui permettrait une mesure de la déformation fiable de l'échantillon.

Dans le cas des mesures *in-situ* à froid dans la chambre d'un MEB, la machine peut être utilisée telle quelle avec une connectique appropriée, alors qu'il est nécessaire de la mettre sous une atmosphère "sèche" lors des essais de Diffraction des Rayons X (DRX), afin d'éviter la formation de givre au contact de l'atmosphère humide. La machine est alors placée dans un film plastique mince perméable aux rayons X, où l'on maintient un flux constant d'azote gazeux.

b) Éprouvettes utilisées, dimensions et préparation

Les éprouvettes ont toutes été prélevées dans un morceau d'acier 16MND5 BQ12 non irradié provenant d'un coupon prélevé lors de la fabrication d'une virole porte-tubulure. Elles ont toutes été réalisées dans le sens T du repère de la cuve, ce qui, compte-tenu de l'isotropie du matériau, n'a pas d'effet notable sur leur comportement [Renevey, 1998]. La fabrication des éprouvettes a été effectuée par électro-érosion à fil.

Trois types d'éprouvettes ont été utilisés (figure III.2). Les éprouvettes de type A pourvues d'une zone utile d'une largeur de 4 mm sont utilisées en DRX avec la machine *in-situ*. Les éprouvettes de type B, dont la largeur de zone utile est de 1 mm sont utilisées pour les cartographies EBSD et les essais de traction associés *in-situ*, afin de limiter la zone à cartographier et de s'assurer qu'on y observe les phénomènes à étudier (déformation plastique ou rupture). Le double décrochement a principalement pour rôle de s'assurer que les congés de la zone utile ne sont pas trop éloignés du cooler. Si cette zone n'était pas bien refroidie, il se produirait une localisation de la déformation au niveau des congés, "plus chauds" et concentrateurs de contrainte, qui nuirait à la représentativité de l'essai sur la zone utile. Enfin, les éprouvettes de type C sont des éprouvettes classiques de traction plane, utilisées lors des essais à basses températures sur machines de traction conventionnelles.

La préparation de ces éprouvettes et de tous les autres échantillons d'étude est réalisée par polissage mécanique, générateur de contraintes résiduelles en surface. Il est donc suivi d'un polissage électrolytique qui permet d'éliminer la couche écrouie. Cet aspect est particulièrement sensible dans le cas des études par DRX, et de l'utilisation de l'EBSD. L'électrolyte D11 fournie par la société Presi a été utilisée avec de bons résultats. Les tensions appliquées variant en fonction de la surface à polir et de la propreté de l'électrolyte, il est impossible de donner une valeur absolue permettant d'obtenir de bons résultats. On notera toutefois qu'il est indispensable que l'électrolyte ne s'échauffe pas en cours de traitement, afin d'éviter de grosses piqûres rendant les échantillons inutilisables. Enfin on rappellera que les inclusions tels que les MnS ou les carbures isolés ont tendance à être expulsés au cours du polissage électrolytique plutôt que révélés. La figure III.1 montre le montage d'une éprouvette de type A avant essai.

III.1.2 Description des essais réalisés

a) Essais *in-situ*

La machine de traction a été utilisée *in-situ* dans le MEB JEOL 5800 LV de l'ENSAM de Metz pour observer la plasticité (éprouvettes B - voir paragraphe III.2) et dans un appareil de DRX pour étudier la répartition des contraintes par phase (éprouvettes A - voir paragraphe III.3).

L'appareil de DRX alors utilisé est un SET-X. Son principal avantage étant ici que c'est le couple canon X-détecteur qui se déplace en cours de détermination des contraintes, et non pas l'échantillon. En effet, ces essais se déroulant à froid, la présence des tuyaux d'alimentation en azote liquide ne permet pas de placer la machine de traction *in-situ* sur un goniomètre. La machine doit rester fixe. Le dispositif expérimental d'essais de DRX à froid est présenté à la figure III.3.

Les essais ont consisté en une traction à rupture interrompue, avec à chaque point d'interruption du chargement une détermination des contraintes internes dans la ferrite (par DRX) selon l'axe de traction ($\phi = 0^\circ$), suivie d'une décharge macroscopique et d'une détermination des contraintes résiduelles dans la ferrite toujours selon le même axe.

Ces essais étaient généralement menés sur une période de quelques heures. Une déviation sur la température de l'échantillon a été observée pendant chacun d'eux, ne dépassant pas +/- 5°C. Au-delà des difficultés expérimentales de ce type d'essais, déjà évoquées [Pesci, 2004], cette campagne d'expériences a été jugée satisfaisante.

Le pic de diffraction utilisé est celui correspondant aux plans {112} de la ferrite avec un rayonnement X obtenu avec une anode de chrome. Les essais ont été menés à basse température (-150°C à -60°C).

b) Essais sur machine conventionnelle :

La machine de traction *in-situ* ne permet pas d'obtenir des informations fiables et précises sur le comportement (la contrainte peut dévier, et l'accès à la déformation n'est pas direct, comme exposé à l'annexe A-II.3). Le contrôle précis d'essais interrompus n'est donc pas facilement réalisable. De plus, les hétérogénéités de contraintes associées aux oscillations $\sin^2\psi$ (voir annexe A-II.2.2) sont déterminées en décharge, ce qui ne nécessite pas de travailler *in-situ*. Une série d'essais de tractions interrompus pour différents niveaux de déformations a donc été menée au centre de recherche EDF R&D des Renardières sur des machines d'essais conventionnelles, à différentes basses températures. Les éprouvettes utilisées ont donc une géométrie plus conventionnelle sans double décrochement (éprouvettes type C). On travaille alors dans une enceinte refroidie par un brouillard d'azote liquide ce qui n'empêche plus l'utilisation des dispositifs d'extensométrie.

Aussi, les oscillations présentées plus loin ont pu être mesurées sur le goniomètre de DRX de marque Seifert du LPMM équipé d'une anode de chrome, plus précis que le SETX.

Les résultats des essais de tractions sont présentés à l'annexe A-I.

III.1.3 Analyse de contraintes par DRX

a) Intérêts des méthodes de DRX

La plupart des méthodes permettant de mesurer ou de déterminer la déformation sur un échantillon sont des méthodes donnant accès à la déformation totale en cours de sollicitation (corrélation d'images, mesures par extensométrie). Cette information seule n'est pas suffisante pour accéder à des valeurs de contraintes.

Ce n'est pas le cas des méthodes basées sur la DRX, qui ont l'avantage de permettre la détermination de la partie élastique de la déformation, liée à la distorsion du réseau cristallin, et donc à l'état de contrainte qui peut directement être déterminé. De plus, les applications sont variées et permettent d'accéder aux valeurs de contrainte en moyenne par phase, mais aussi par orientation cristallographique (voir annexe A-II.2). C'est donc un outil privilégié pour la caractérisation de l'état mécanique. Les analyses effectués sur les appareils de diffraction standards (par opposition aux analyses aux grands instruments) sont des analyse de surface : la pénétration du rayonnement et son interaction avec la matière se fait sur une épaisseur de l'ordre de la dizaine de micromètres.

b) Les différents ordres de contrainte, notions d'échelles :

Le cas des matériaux polycristallins (*a fortiori* multiphasés comme l'acier 16MND5), nécessite un éclaircissement concernant les échelles envisagées. Que ce soit au niveau des expérimentations de diffraction ou de la modélisation, les hétérogénéités ne seront pas les mêmes selon que l'on considère la pièce, les phases en moyenne, les différents grains, voire l'intérieur d'un grain. En ajoutant à cela que les préfixes couramment utilisés pour décrire les échelles (micro, macro...) font rarement l'unanimité au sein de la communauté (le macro des uns pouvant devenir le micro des autres), il convient de les définir pour éclaircir la réflexion. En mécanique des matériaux solides, et particulièrement pour les matériaux métalliques polycristallins, on peut ainsi définir trois ordres de description, et leur associer le vocabulaire des échelles :

- **L'ordre I** : c'est l'ordre où l'on décrit le matériau en moyenne, sur un nombre suffisant de grains (voire sur la structure). On l'associe à l'échelle macroscopique. Dans le cas d'un matériau biphasé comme la bainite, on pourra ajouter l'ordre pseudo-macroscopique, associé à une description moyenne par phase. Les hétérogénéités mécaniques décrites seront alors qualifiées d'interphases.
- **L'ordre II** : c'est l'échelle où l'on représente les contraintes moyennes par grains, encore qualifiée d'échelle mésoscopique. Les hétérogénéités mécaniques considérées à cette échelle seront les hétérogénéités intergranulaires.
- **L'ordre III** : c'est l'ordre où l'on prend en compte les hétérogénéités mécaniques à l'intérieur des grains (intragranulaires). On parle encore d'échelle microscopique.

Cette description est reprise dans la suite des travaux, bien que l'on préfère nommer généralement explicitement chacune de ces échelles.

c) Méthode des $\sin^2\psi$: accès à la contrainte moyenne dans la ferrite

Le principe de la méthode des $\sin^2\psi$ est donné en annexe (partie A-II.2.2). La méthode permet notamment d'accéder à la contrainte macroscopique projetée sur une direction donnée de l'échantillon (ici la direction de traction).

On rappelle que, pour cette méthode, chaque point de mesure donne la déformation élastique du volume diffractant de la ferrite projetée sur la direction de mesure représentée par le doublet d'angles $(\phi; \psi)$ (voir figure III.3). Par ailleurs, la contrainte est proportionnelle à la pente moyenne de la courbe $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$ qui comprend toutes ces mesures. Ainsi la pente positive observée à la figure III.4.a traduit un état de contrainte de traction dans la direction de mesure en charge, là où la pente négative de la figure III.4.b traduit un état de contrainte de compression après décharge.

L'application de cette méthode n'est pas correcte dans le cas des matériaux macroscopiquement anisotropes, et plus particulièrement pour ceux qui possèdent une forte texture cristallographique. Dans le cas de ces matériaux, il apparaît une ondulation assez marquée de la courbe $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$, qui traduit alors l'hétérogénéité de déformation élastique et plastique des grains due à l'anisotropie, et/ou à l'hétérogénéité des déformations par orientation cristallographique.

Les Constantes Élastiques Radiocristallographiques (CER) isotropes qui sont utilisées ici pour déterminer la contrainte doivent être considérées ici avec une certaine prudence. En effet, lorsque l'on met en oeuvre la méthode pour la ferrite de l'acier 16MND5 aux basses températures, il apparaît justement une forte oscillation après la décharge (figure III.4.b). Lors de détermination de contrainte en charge, cette oscillation est négligeable devant la pente de la courbe (figure III.4.a). Les déterminations de contraintes seront donc tout à fait fiables en charge où la courbe $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$ est relativement linéaire. Par contre, elles seront entachées d'une plus forte incertitude en décharge, qui sera due à l'oscillation. Un bon moyen d'améliorer la validité des résultats est d'utiliser une plage en ψ suffisante pour s'assurer une bonne représentation de la pente moyenne approchée de la courbe [Pesci, 2004].

La ferrite de l'acier 16MND5 n'est pas à proprement parler un matériau élastiquement isotrope (à l'échelle du monocristal, on considère plutôt une élasticité de symétrie cubique), et sa déformation élastique n'est pas non plus homogène, du fait de cette anisotropie microscopique. Le problème est donc de savoir si l'utilisation des CER isotropes est justifiée ou pas.

La méthode des $\sin^2\psi$ a déjà été utilisée avec succès dans plusieurs études portant sur la répartition des contraintes dans des aciers comportant une part significative de ferrite, [Pesci, 2004, Inal, 1996, Belassel, 1994]. En fait, si la ferrite est microscopiquement anisotrope, le comportement du polycristal ferritique, et donc de la phase ferritique

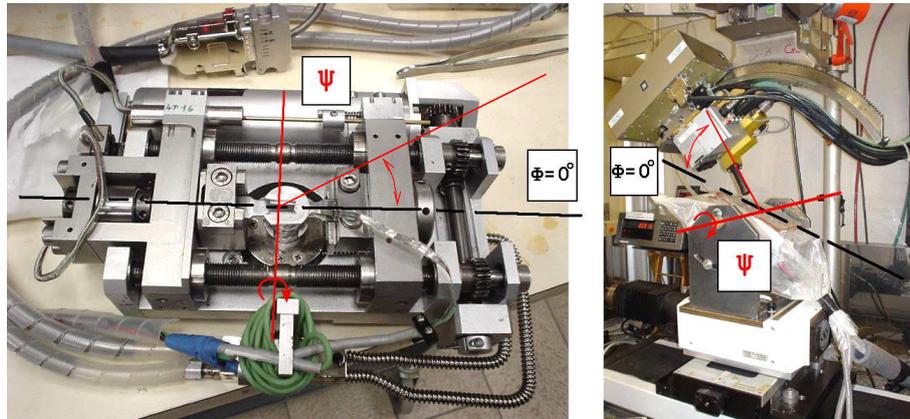


FIG. III.3 – Le dispositif expérimental de diffraction *in-situ* à froid. La direction $\phi = 0^\circ$ représente la direction de détermination de la contrainte (ici la direction de traction). Seul l'angle ψ varie pour la méthode, il détermine la direction de mesure de DRX.

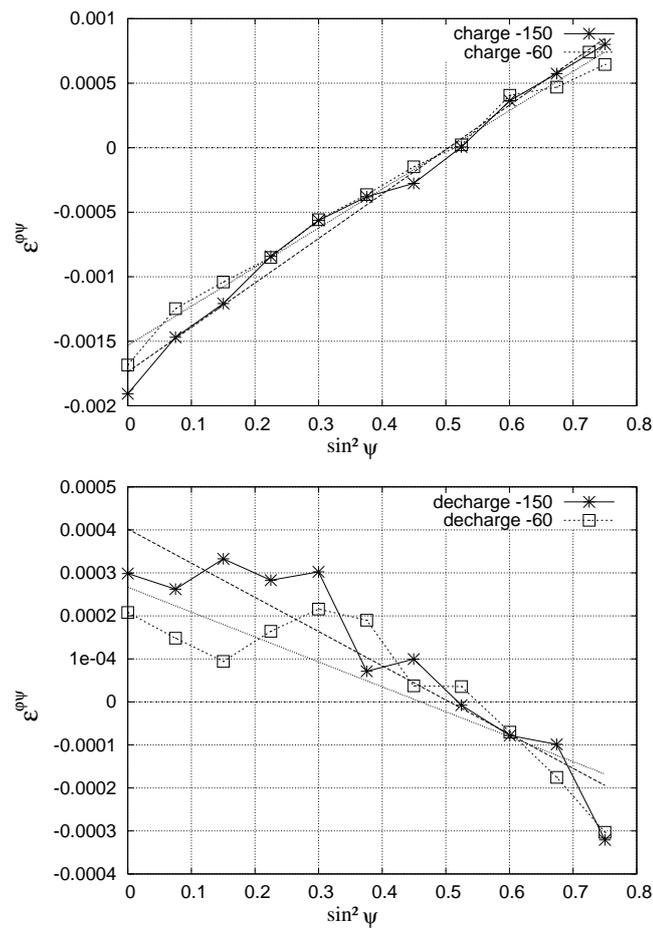


FIG. III.4 – Les oscillations des courbes $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$ pour une déformation $\varepsilon^t = 10\%$, à différentes températures. a) En charge, b) en décharge.

(*a fortiori* pour une faible taille de grains, et une texture isotrope) peut être considéré comme macroscopiquement isotrope, justifiant l'emploi des CER isotropes.

d) Oscillations et blocs de cristaux pour l'acier 16MND5 : hétérogénéités au sein de la phase ferritique

Le fait que ces oscillations de la courbe $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$ ne soient observables qu'en décharge renseigne sur leur nature. Elles sont dues aux hétérogénéités de contraintes induites par les différentes orientations cristallographiques de la ferrite. Le matériau qui ne présente pas de texture à l'état initial, ne développe qu'une très faible texture en cours d'essai. A cela s'ajoute une taille de grains assez petite en regard de la taille de sonde X. Ainsi, les oscillations, obtenues par l'intermédiaire de l'application de la méthode des $\sin^2\psi$, correspondent bien à une hétérogénéité de contrainte (i.e. de déformation élastique) au sein de la phase ferritique. On les utilise donc en tant que telles.

De la même façon, le recours à la méthode des Blocs De Cristaux (BDC, cf annexe A-II.2.3) permet d'accéder au tenseur de contrainte dans la ferrite pour une orientation cristallographique donnée. Pour appliquer la méthode des BDC à l'acier 16MND5, (i.e. à la ferrite), l'idéal est d'utiliser la détermination des pics de diffraction associés à la famille de plans cristallographiques $\{123\}$, car elle possède une forte multiplicité (24 mesures dans l'espace). On rappelle en effet que l'erreur et l'incertitude de mesure dépendent directement du nombre de pics utilisés.

Toutefois, les essais avec ces pics sur l'acier 16MND5 n'ont pas donné de résultats probants avec l'appareillage utilisé. Les pics de la famille $\{112\}$ ont donc été utilisés. Ils sont moins nombreux de par une plus faible multiplicité. Il existe de plus une limite angulaire inhérente aux mesures de diffraction : à fort angle ψ , soit pour un rayon incident 'rasant', les rayons X ne pénètrent plus la matière suffisamment, ils sont réfléchis plutôt qu'absorbés et diffractés. Les angles ψ accessibles maximaux sont ainsi de l'ordre de 75° , ce qui limite encore la possibilité d'effectuer ces mesures. Des essais ont toutefois été menés avec succès sur quelques orientations particulières, ce qui sera détaillé au paragraphe III.3.2.c) qui présente les résultats obtenus grâce à cette méthode.

En utilisant judicieusement les méthodes de DRX, on a donc accès à trois informations :

- **La répartition des contraintes entre les phases** grâce aux essais de tractions *in-situ* couplés à la méthode des $\sin^2\psi$. On peut suivre en même temps l'évolution de la contrainte macroscopique et de la contrainte moyenne dans la phase ferritique en cours de traction (ordre I ou pseudo-macroscopique).
- **La répartition des contraintes au sein de la phase ferritique en décharge** qui est caractérisée par l'oscillation de la courbe $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$. On peut comprendre cette oscillation comme une "image" de la répartition des contraintes à l'ordre II.
- **La valeur du tenseur de contraintes résiduelles pour quelques orientations particulières** qui est accessible au moyen de la méthode des BDC. Là aussi on a accès à une valeur à l'ordre II.

Associées aux observations qualitatives menées *in-situ* lors de tractions à basses températures sur des éprouvettes préalablement cartographiées en EBSD, qui permettent d'observer qualitativement les hétérogénéités de déformation pour l'ordre III (intragranulaire) on dispose d'un panel permettant de caractériser les hétérogénéités pour les 3 ordres.

III.2 Observations des hétérogénéités à basses températures

III.2.1 Observations réalisées *in-situ*

Plusieurs éprouvettes de type B ont été utilisées. Des tractions à froid (-150°C) à l'intérieur de l'enceinte d'un MEB ont été effectuées après une cartographie EBSD du centre de la zone utile. Le logiciel associé au matériel EBSD permet d'effectuer divers traitements de l'information une fois la cartographie réalisée :

- Mettre en évidence les paquets, en colorant les points indexés selon leur orientation.
- Faire ressortir les désorientations entre paquets de ferrite orientés différemment, en les colorant selon qu'il s'agit d'une faible ou forte désorientation.
- Calculer en chaque point indexé le facteur de Schmid maximal (sur l'ensemble des systèmes) pour une famille de systèmes de glissement donnée par rapport à un axe de traction donné par l'utilisateur, et là aussi y associer une couleur.

Ces divers traitements ont été effectués, et plusieurs zones d'études ont été choisies. La figure III.5 présente ces résultats pour deux zones A et B, ainsi qu'une observation au MEB de ces zones avant traction (qui permettent de localiser les amas de carbures). Deux observations de surface en cours de traction sont présentées. La légende des diverses analyses EBSD se trouve à la figure III.6.

Ces expériences n'ont rien de trivial, et les difficultés rencontrées précédemment par Pesci [Pesci, 2004] l'ont été cette fois encore. Toutefois, plusieurs essais ont été menés à leur terme, et les deux observations montrées ci-après sont représentatives des observations générales.

Les observations que l'on fait sont bien évidemment qualitatives. L'utilisation des méthodes de mesure de champs cinématiques (corrélation d'images sur microgrilles ou microstructure) permet d'envisager une approche plus quantitative des phénomènes. Toutefois, plusieurs problèmes posés par ces méthodes, et non résolus actuellement ne permettent pas d'envisager une utilisation simple et directe de ces outils, ce qui sera discuté notamment dans la partie IV.2.4.

a) Effet de l'orientation sur l'entrée en plasticité

L'observation de l'évolution de la déformation de la zone B de la figure III.5 renseigne sur la pertinence de l'information fournie par la coloration en fonction du facteur de Schmid

maximal. On constate sur cette zone que le paquet situé au centre (1) et celui situé en bas à gauche du cliché (2) entrent en plasticité, et présentent des zones de forte localisation. Leurs colorations plus claires sur les cartographies *c* et *d* de la figure témoignent d'une orientation défavorable à l'entrée en plasticité au sens du facteur de Schmid. On peut donc émettre deux hypothèses : soit ce sont les paquets voisins qui leur transmettent la plasticité au niveau des joints de grains (les paquets (1) et (2) accommoderaient les déformations des autres paquets), soit l'information donnée par le facteur de Schmid n'est pas vraiment pertinente prise seule.

Néanmoins, il est bien évident que les contraintes vues par le paquet plongé dans le polycristal sont différentes en chaque point, et sûrement éloignées d'une traction uniaxiale, notamment une fois la plasticité mise en place, ce qui peut limiter l'intérêt de la connaissance des facteurs de Schmid. Toutefois, l'effet de l'orientation de la matrice ferritique reste le facteur le plus influent pour ce qui est du moment de l'entrée en plasticité. Cela sera confirmé par ailleurs par les résultats obtenus en DRX par la méthode des BDC.

La zone A possède des joints de fortes désorientations (3), mais les paquets sont orientés de manière quasi équivalente pour l'entrée en plasticité par rapport à l'axe de traction (leurs facteurs de Schmid maximaux sont équivalents). On observe moins les phénomènes d'hétérogénéités de déformation sur cette zone. Cela montre bien que l'apparition des plus fortes hétérogénéités nécessite parfois la présence d'un joint de forte désorientation, mais surtout que ces orientations ne soient pas équivalentes en terme de moment d'entrée en plasticité.

b) Effet des carbures sur la plasticité

Les carbures sont majoritairement répartis en amas. On distingue clairement sur les zones repérées (4) de la figure III.5 la tendance qu'ont les lignes de glissement à "contourner" les parties comportant des amas de cémentite, au sein même d'un paquet de même orientation (le paquet repéré (1)). Les zones fortement chargées en cémentite ont alors tendance à se comporter comme une seconde phase (ferrite+cémentite) plus dure. Cette observation est affinée un peu plus loin grâce aux observations *post-mortem* (figure III.9). Si l'effet des amas est facilement observable sur les observations microscopiques, elles ne permettent pas de conclure sur l'effet des carbures beaucoup plus petits et répartis uniformément.

Par ailleurs, on notera que les observations de Sekfali [Sekfali, 2004] ne sont pas tout à fait les mêmes. Ses observations au MEB-FEG, montrent bien que les lignes de glissement sont fortement perturbées à proximité des îlots de cémentite, mais aussi qu'elles passent à travers ces îlots. On remarquera toutefois que son matériau d'étude est un acier 16MND5 de composition légèrement différente de la nuance étudiée ici, et qu'il a subi des traitements thermiques différents, menant à une morphologie des îlots et même des carbures beaucoup plus allongée que dans notre cas.

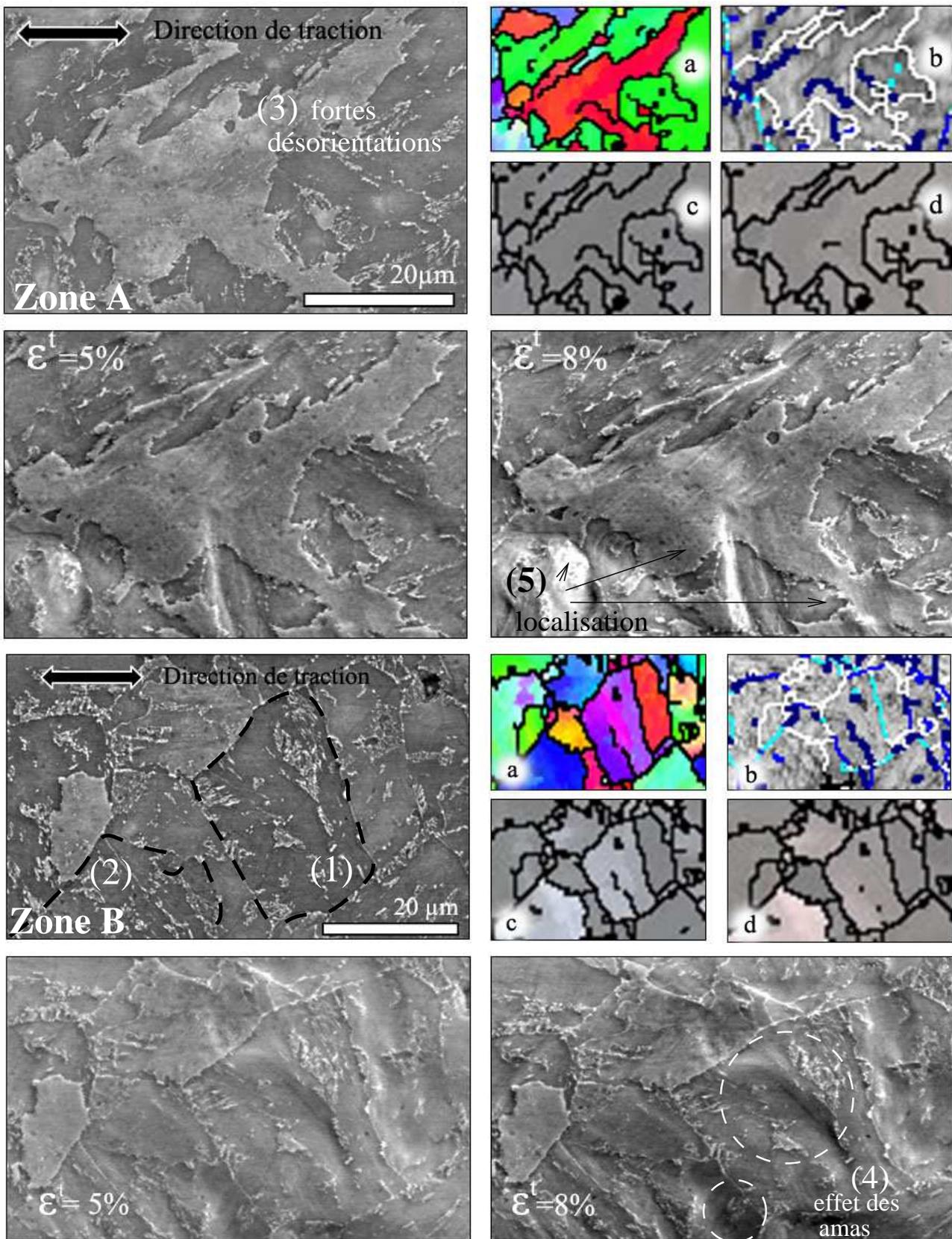


FIG. III.5 – Observations de surface des zones **A** et **B** lors d'une traction *in-situ* à -150°C . Des informations obtenues par EBSD sont données : a) Coloration IPF de l'orientation de la direction de traction dans le cristal, b) Mise en évidence des désorientations, c) Facteur de Schmid maximal pour la famille de glissement $\langle 111 \rangle \{ 110 \}$, d) idem pour la famille $\langle 111 \rangle \{ 112 \}$.

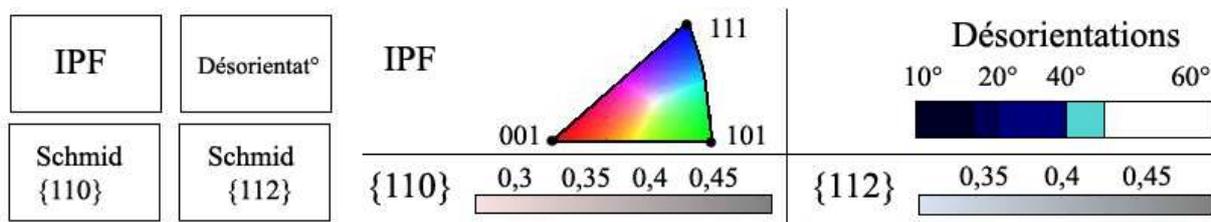


FIG. III.6 – Légende des cartographies tirées de l'EBSD de la figure III.5.

Les travaux de thèse de Pesci [Pesci, 2004] sont parmi les premiers à prendre en compte le biphasage ferrite/cémentite pour la bainite. La répartition y est considérée comme homogène (au travers d'un modèle d'homogénéisation à deux échelles), bien que l'idée de considérer la ferrite et la ferrite très chargée en cémentite comme deux matériaux différents y ait été évoquée.

On résumera l'effet des amas de carbures sur la matrice ferritique en le dénommant "effet composite".

c) Effet des joints de grains

La zone A ne comporte quasiment que des joints de paquets de forte désorientation, alors que la zone B montre une structure plus habituelle de paquets quasiment équiaxes dont les désorientations sont variées. On s'attend à ce que les joints créant les plus fortes hétérogénéités de déformation soient ceux de forte désorientation. Cette constatation est assez difficile à généraliser, puisque la condition de désorientation entre réseaux cristallins n'est pas suffisante.

Sur la zone A, on distingue quelques fortes hétérogénéités de déformation au niveau des joints de paquets fortement désorientés(5), alors qu'on en observe beaucoup plus sur la zone B. Les joints de relativement faible désorientation ne semblent pas créer de réels obstacles à la transmission de la plasticité entre paquets.

L'effet des désorientations entre grains adjacents doit donc être combiné à l'effet de l'orientation de la matrice ferritique qui commande son entrée plus ou moins tardive en plasticité pour créer une hétérogénéité de déformation. Cet effet sera dénommé "effet polycristal".

III.2.2 Observations au MEB-FEG d'éprouvettes *post-mortem*

Les éprouvettes de type B ont été observées après traction à l'aide du MEB-FEG disponible au centre de recherche EDF des Renardières. La procédure permettant d'associer les images de deux détecteurs différents est décrite à l'annexe A-II.1.2.

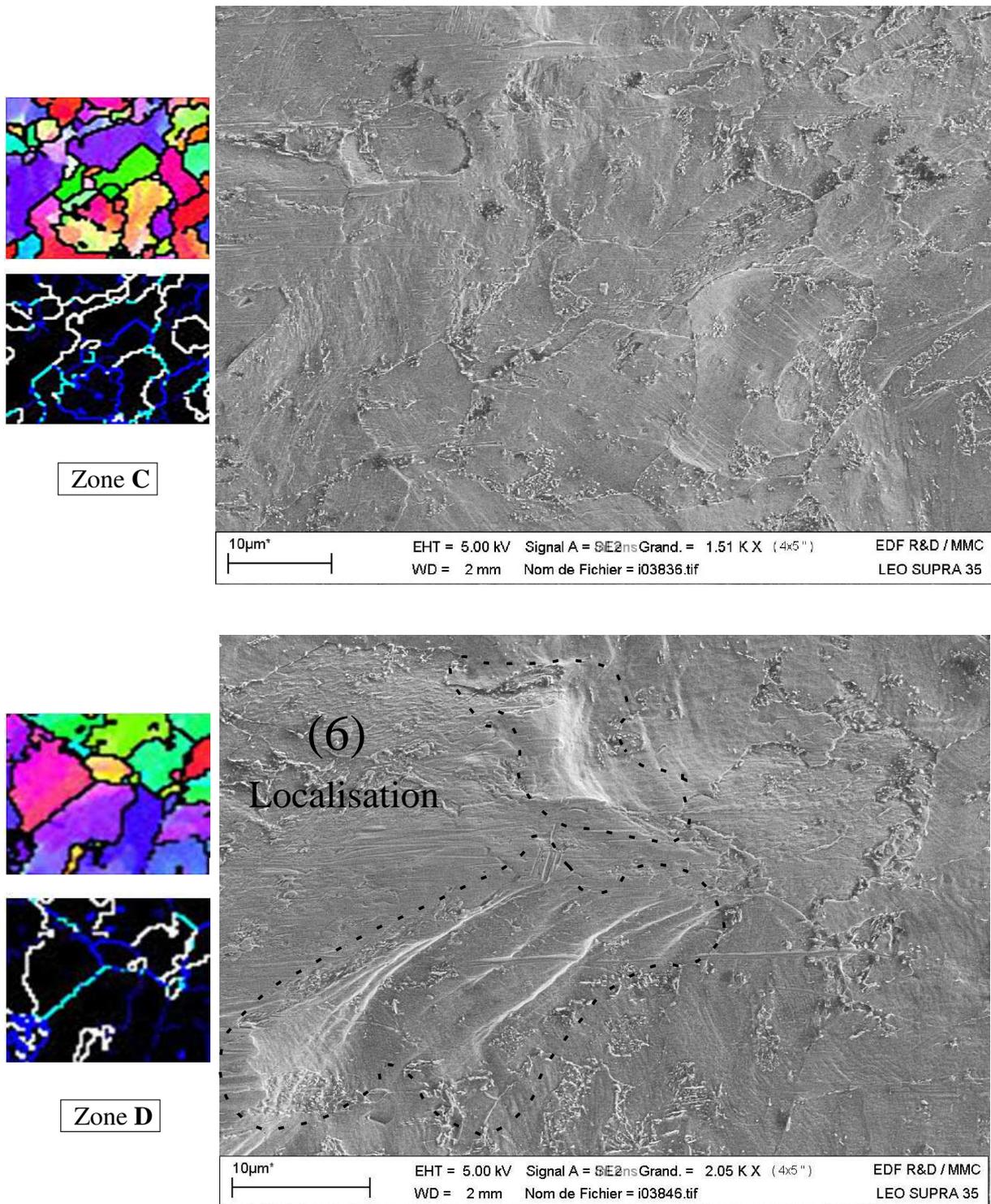


FIG. III.7 – Observations *post-mortem* couplées à l'EBSA de zones déformées en traction à -150°C ($\epsilon_{11}=0.15$). Illustration de l'influence des tailles de paquets de lattes sur la localisation de la déformation.

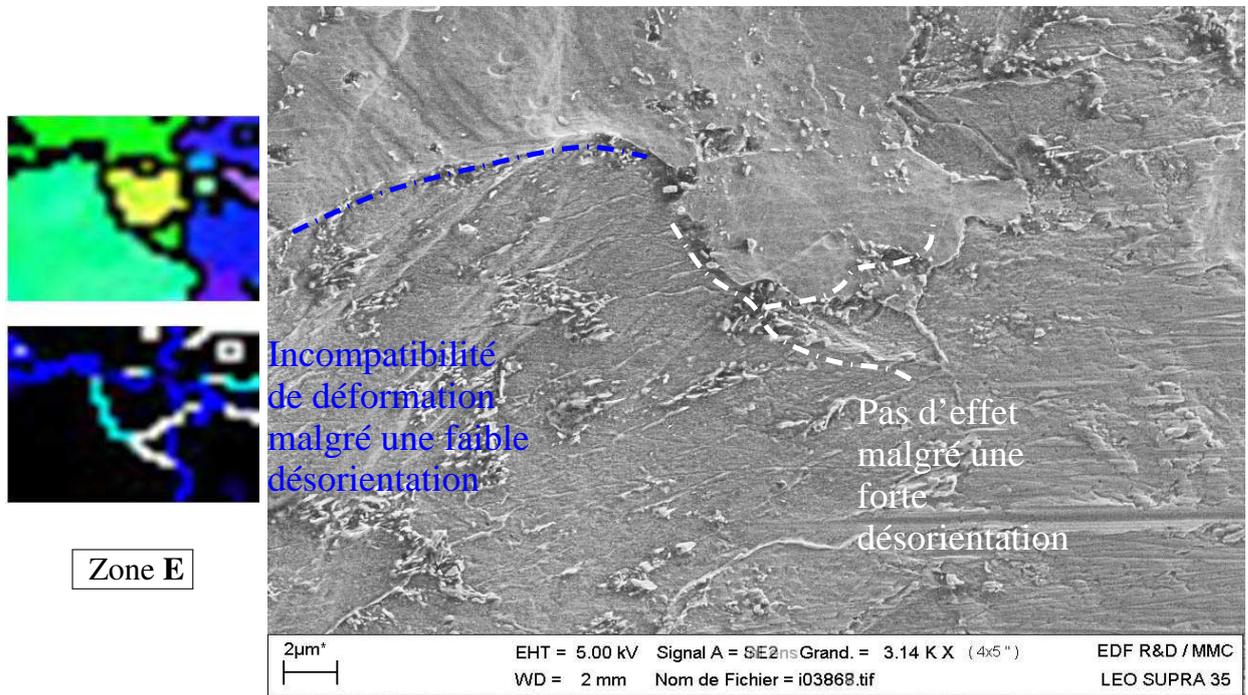


FIG. III.8 – Observations *post-mortem* couplées à l’EBSD de zones déformées en traction à -150°C ($\epsilon_{11}=0.13$). Illustration du fait que la seule information de désorientation aux joints de grains ne suffit pas à prévoir l’intensité des incompatibilités de déformation.

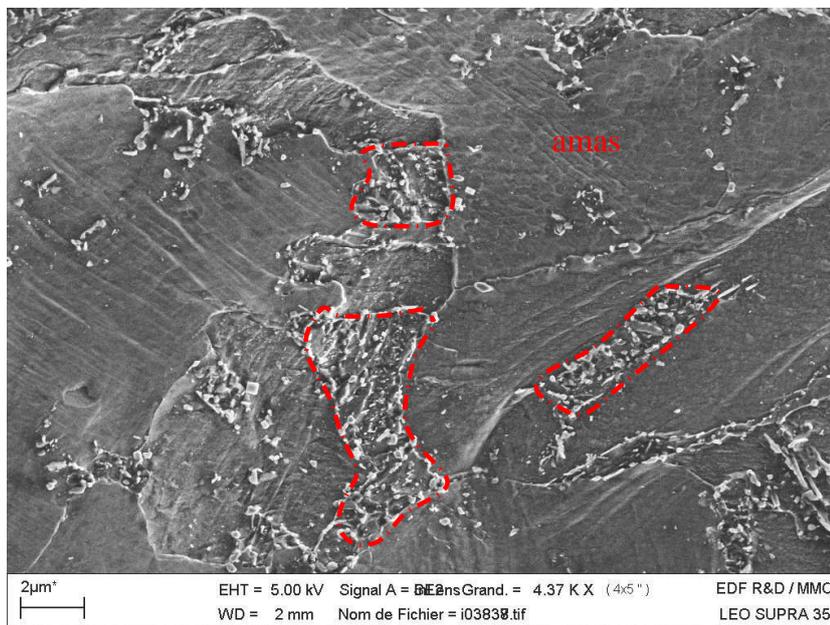


FIG. III.9 – Détail d’observation *post-mortem* permettant d’observer l’effet “composite” à -150°C ($\epsilon_{11}=0.13$). On constate bien ici que les lignes de glissements sont arrêtées par les amas de cémentite.

a) Effet de la taille des paquets

Plusieurs zones d'étude intéressantes sont présentées à la figure III.7. Les zones C et D montrent l'importance des joints de grains où se localisent de forts gradients de déformations. Malgré une échelle différente, on observe sur la zone C une plus forte densité en joints de grains et donc une déformation plus homogène, sans forte localisation, que sur la zone D constituée de plus gros grains qui permettent de développer des localisations étendues de la déformation (6).

b) Pertinence de l'information de désorientation

La zone E de la figure III.8 contient quant à elle des joints de grains de désorientations plus ou moins importantes. Toutefois, elle permet à nouveau d'observer que la désorientation entre deux grains voisins ne permet pas à elle seule d'expliquer les fortes hétérogénéités (la localisation au joint de grains semblant ici plus forte au niveau de joints faiblement désorientés (7)). L'importance de l'orientation des grains par rapport au chargement macroscopique a ici aussi une importance primordiale.

Les travaux de Sekfali [Sekfali, 2004] utilisent eux aussi les analyses EBSD couplées aux observations après déformation de structures martensitiques et bainitiques revenues. Les observations faites sont relativement proches, bien que le matériau alors étudié à température ambiante soit plus facilement déformable de par une plus faible limite d'élasticité.

Par ailleurs, on retrouve sur la figure III.9 l'effet composite. On observe bien l'arrêt de la plasticité au niveau des amas de cémentite.

III.2.3 Effets "composite" et "polycristal"

En conclusion, ces observations *in-situ* permettent de mettre en évidence plusieurs effets combinés de la microstructure sur la formation d'hétérogénéités de déformation et de contrainte :

- La présence de carbures au sein de la microstructure semble avoir un effet différent selon qu'on les trouve répartis dans la matrice ferritique, ou réunis en amas, où ils ont tendance à former avec la ferrite contiguë une phase dure (effet "composite"), dans laquelle la plasticité n'est pas ou peu transmise depuis la matrice ferritique environnante.
- Les orientations des paquets de lattes par rapport au chargement macroscopique constituent la première source d'hétérogénéités de déformation en moyenne par grain, en influant sur le moment d'entrée en plasticité (effet "polycristal"). Les désorientations entre grains voisins ont par ailleurs une influence sur les hétérogénéités intragranulaires. Il s'agit ici d'un effet de voisinage que l'on qualifiera de second ordre.

Les expériences de DRX menées et présentées dans la partie suivante vont permettre de quantifier en termes de valeurs de contraintes les deux effets “composite” et “polycristal” qui viennent d’être décrits.

III.3 Hétérogénéités de contraintes quantifiées par DRX

III.3.1 Répartition des contraintes entre les phases : essais de traction *in-situ* et DRX

a) Résultats des essais

On notera (figure III.10) que pour la contrainte macroscopique, la courbe de comportement et la valeur au moment de la mesure par diffraction ont été présentées. Lors d’une interruption de la traction en charge, il se produit avec la machine *in-situ* une lente décharge élastique de l’échantillon dont les causes n’ont pas pu être déterminées (un problème de rattrapage de jeux dans la chaîne de transmission de puissance paraissant l’explication la plus probable). En charge, il conviendra donc de comparer les valeurs marquées d’un signe pour avoir une bonne idée de la différence de chargement macroscopique entre bainite et matrice ferritique. Le problème ne se pose évidemment pas lorsque l’on effectue une décharge macroscopique.

Les résultats détaillés des trois essais à -150°C , et de l’essai à -60°C sont présentés aux figures III.10 et III.11. Sur ces graphes, on observe sous forme de ligne continue le comportement en cours d’essai, les symboles représentant la contrainte au moment de la mesure. Tous les graphes ont été représentés avec la même échelle afin de faciliter la comparaison.

Un des problèmes soulevés par les travaux de [Pesci, 2004] se situait au niveau de la reproductibilité des essais de traction à froid avec la machine *in-situ*. Les essais à -150°C ont donc été rassemblés sur la figure III.12 afin de permettre une comparaison.

b) Discussion

La reproductibilité de l’essai est bonne. Pour les trois essais à -150°C , les résultats sont très proches (différence entre les valeurs de contraintes macroscopiques : 50 MPa maximum). Au niveau des déterminations de contrainte par la méthode des $\sin^2\psi$, on constate aussi que les résultats sont relativement proches (figure III.12). Seule la déformation à rupture est différente entre les essais. La petite taille de zone utile des éprouvettes rend vraisemblablement l’essai plus sensible à la présence ou non de défauts pouvant provoquer une amorce de rupture à différents niveaux de déformation (c’est l’effet de taille, expliqué au chapitre V.2.3).

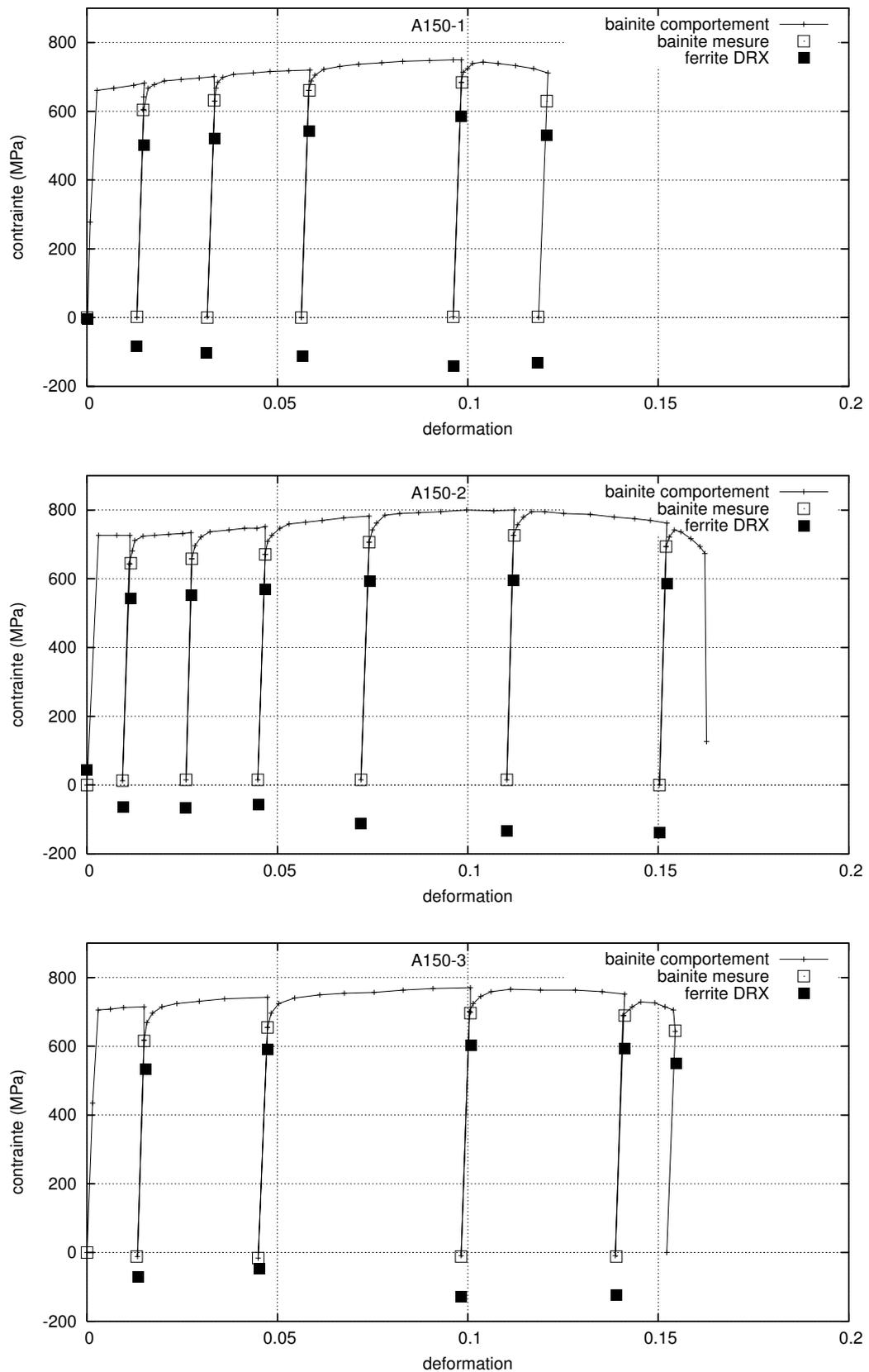


FIG. III.10 – Traction et DRX : échantillons testés à -150°C . L'incertitude maximale sur la détermination de contrainte est de ± 20 MPa en charge et de ± 35 MPa en décharge.

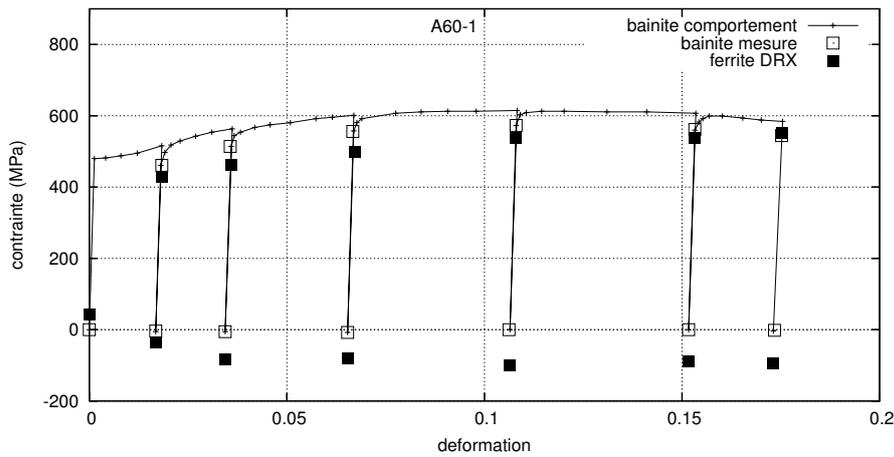


FIG. III.11 – Traction et DRX : éprouvette testée à -60°C . L'incertitude maximale sur la détermination de contrainte est de ± 15 MPa en charge et de ± 30 MPa en décharge.

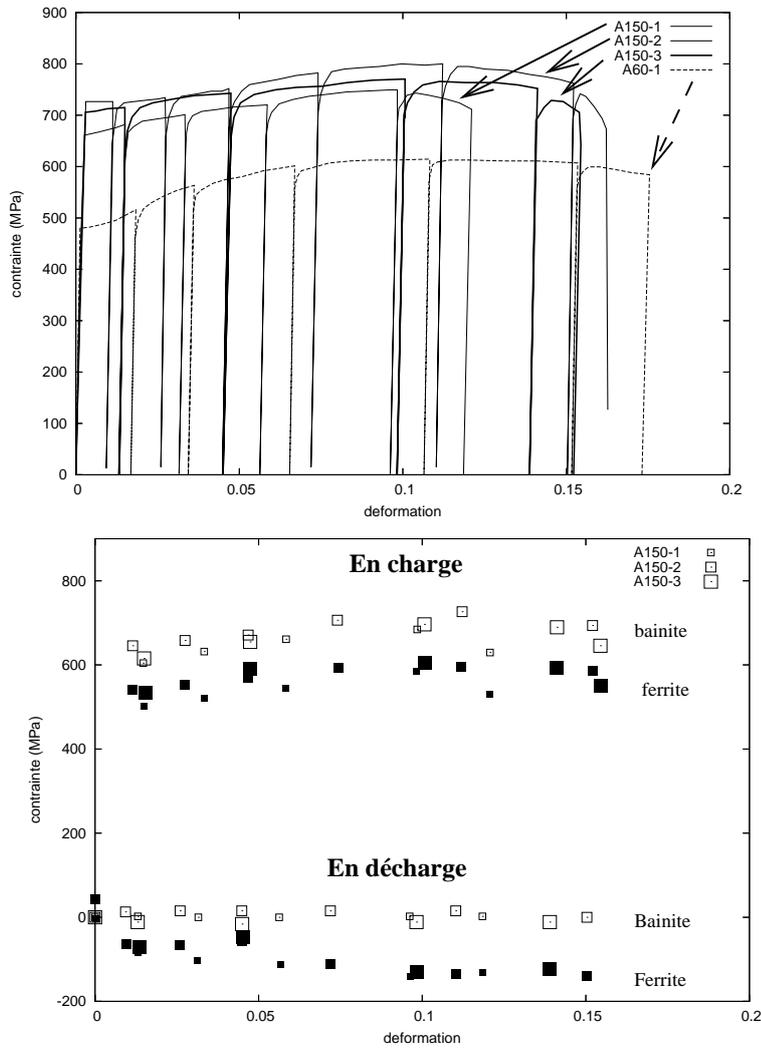


FIG. III.12 – Les trois essais à -150°C : comparaison des résultats.

La différence de contrainte macroscopique en charge entre la phase ferritique et la bainite (l'effet composite), est ici bien marquée. Ces résultats sont en accord avec ceux déjà obtenus sur l'acier 16MND5 [Pesci, 2004].

La différence d'état de contrainte semble moins importante lorsque l'on augmente la température de sollicitation (jusqu'à environ 110 MPa à -150°C , pour environ 70 MPa à -60°C). Il faudrait répéter l'essai à -60°C pour confirmer cette observation. Toutefois, il semble raisonnable de penser en première approche que cette différence est proportionnellement liée à l'état de contrainte macroscopique atteint, lui-même dépendant de la limite d'élasticité qui varie avec la température.

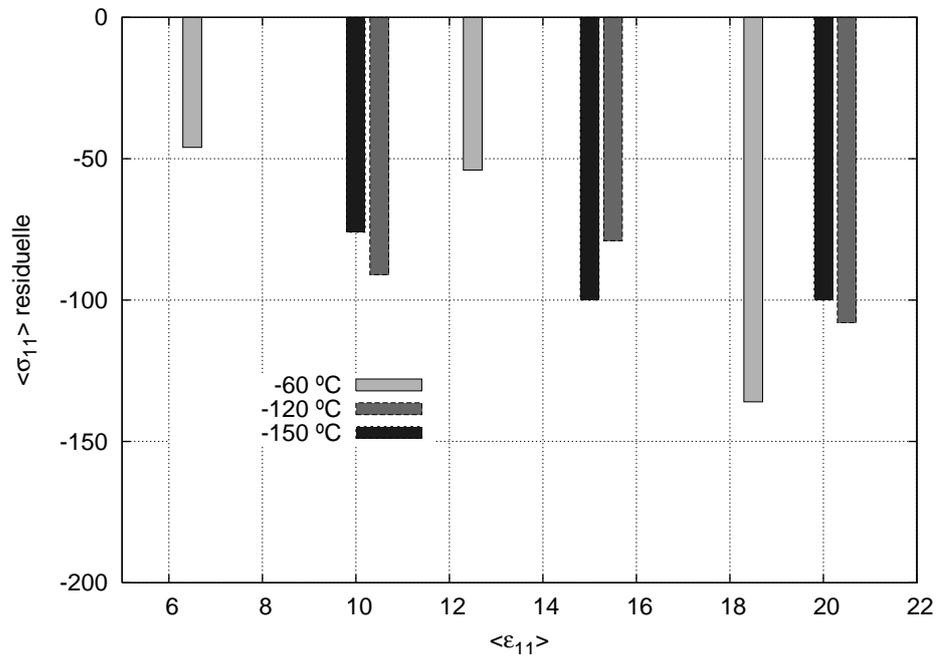
Cette hétérogénéité entre la phase ferritique et la bainite est due à l'accommodation plastique, par la ferrite, de la déformation alors que la cémentite reste élastique en cours de traction. L'hétérogénéité de contrainte, présente dès le début des essais semble relativement constante en cours de charge.

c) Contraintes résiduelles dans la ferrite en fonction de la déformation et de la température

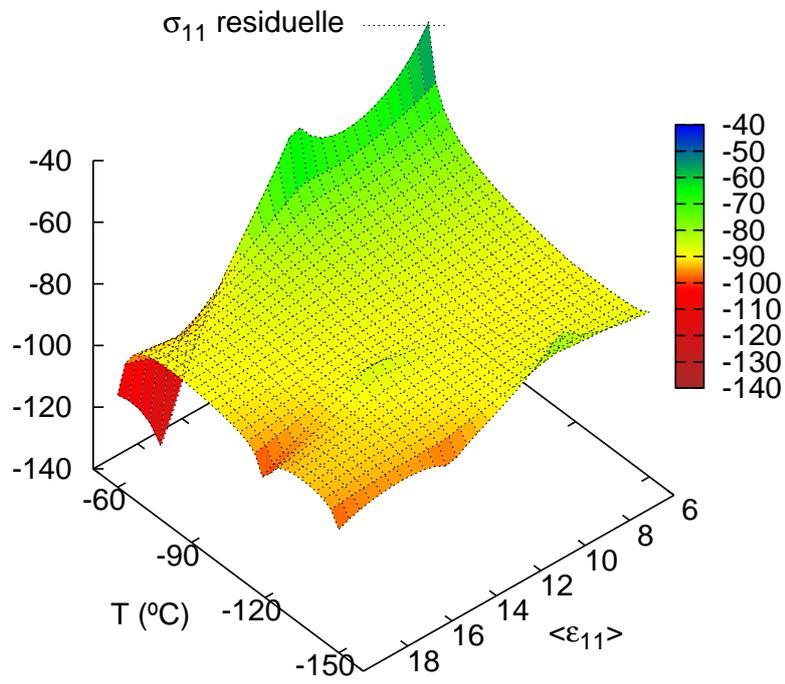
Après décharge élastique, la différence de contrainte subsiste. Pour une bainite macroscopiquement déchargée, la ferrite est en compression, avec des valeurs de contrainte dans la direction de traction qui atteignent -150 MPa. Toutefois, la contrainte résiduelle dans la ferrite, contrairement à la différence en charge évoquée précédemment, augmente en cours d'essai, jusqu'à ce que la déformation atteigne la limite à rupture. Cette légère augmentation de la contrainte résiduelle est liée à l'augmentation de l'écroutissage macroscopique et donc de la déformation plastique équivalente. Enfin, puisque l'on est macroscopiquement déchargé, la cémentite doit globalement être chargée en traction. La valeur n'est pas accessible expérimentalement, mais peut être estimée largement supérieure en valeur absolue à celle de la ferrite vu la faible fraction volumique de cémentite.

La figure III.13 présente les résultats en contrainte résiduelle de la ferrite dans la direction de traction. Ces résultats dans la direction de traction seront à comparer aux résultats obtenus plus localement pour la méthode des BDC. On notera que les résultats sont obtenus par analyse DRX des éprouvettes de type C, sauf pour les essais à -60°C qui sont faits sur des éprouvettes de type B.

L'erreur maximale sur la détermination de contrainte est de ± 10 MPa. La contrainte résiduelle est plus forte aux plus basses températures (de -80 MPa à -120°C à -100 MPa à -150°C pour une déformation macroscopique de 15%) et aux fortes déformations (de -75 MPa pour 10% de déformation à -100 MPa pour 20% de déformation à -150°C). L'éprouvette amenée à striction à -60°C n'est pas représentative. Il semble que la forme de l'éprouvette (type B) utilisée favorise une apparition de la striction à de plus faibles déformations macroscopiques que les éprouvettes de type C. C'est la zone utile un peu courte qui perturbe les champs mécaniques et amène une instabilité à des niveaux de déformation macroscopique plus faibles.



a)



b)

FIG. III.13 – Valeur de la contrainte résiduelle dans la ferrite dans la direction de traction, pour différentes températures de sollicitation et différents niveaux de déformation. Résultats présentés sous forme : a) de diagramme en bâtons, b) de surface dans l'espace (E_{11}, T, σ_{res}).

III.3.2 Hétérogénéités au sein de la phase ferritique : oscillations et blocs de cristaux

Les résultats qui suivent ont été obtenus en décharge après essais préalables de traction à basses températures sur machine conventionnelle.

a) Oscillation des courbes $\sin^2\psi$

Plusieurs séries d'éprouvettes ont été testées en traction au cours de ces travaux. Les résultats sont présentés à la figure III.14. Par ailleurs une éprouvette testée en *in-situ* à -160°C avec une nouvelle machine de traction a été ajoutée au sein du comparatif en température. On notera que dans le cas de cette éprouvette, la déformation macroscopique est estimée par l'allongement relatif de la partie utile, et non pas mesurée en cours de traction par un extensomètre.

b) Influence de la température

Il est nécessaire que les éprouvettes aient atteint un niveau de déformation macroscopique assez significatif pour qu'on puisse distinguer une oscillation de la courbe $\epsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$. On le vérifie en observant les faibles oscillations de la courbe obtenue à -60°C pour une déformation macroscopique de 6%.

Plus généralement, pour chaque température, les oscillations (i.e. les hétérogénéités de contrainte) augmentent avec le niveau de déformation plastique. Par ailleurs, pour les trois températures d'essais, les résultats présentés sont obtenus hors de la zone de striction d'une éprouvette ayant atteint la striction en traction. Les déformations atteintes avant localisation ou rupture étant bien plus fortes aux plus hautes températures (ici -60°C), les courbes présentant le plus d'intensité d'oscillations sont obtenues pour ces températures. Seule l'intensité des oscillations varie avec la température, l'allure ne varie pas.

Le dernier graphique de la figure III.14 permet de comparer les oscillations déterminées à différentes températures pour des niveaux de déformation macroscopiques relativement proches. Les oscillations sont plus intenses lorsque l'on abaisse la température. Cela s'explique par une augmentation du niveau de contrainte moyen en cours de charge, et donc des niveaux d'hétérogénéités, à déformation équivalente.

c) Contraintes résiduelles par orientation : méthode des BDC

La méthode des blocs de cristaux a été appliquée pour trois orientations, présentées en figure III.15. Le choix d'orientation était relativement restreint : comme déjà évoqué, l'utilisation des pics de diffraction des plans de la famille $\{112\}$, de relativement faible multiplicité pour la méthode, contraint à prendre des orientations permettant d'avoir un nombre suffisant de pics accessibles. Néanmoins, deux orientations "extrêmes" ont pu être prises en compte : l'orientation nommée A est celle qui correspond aux grains dont

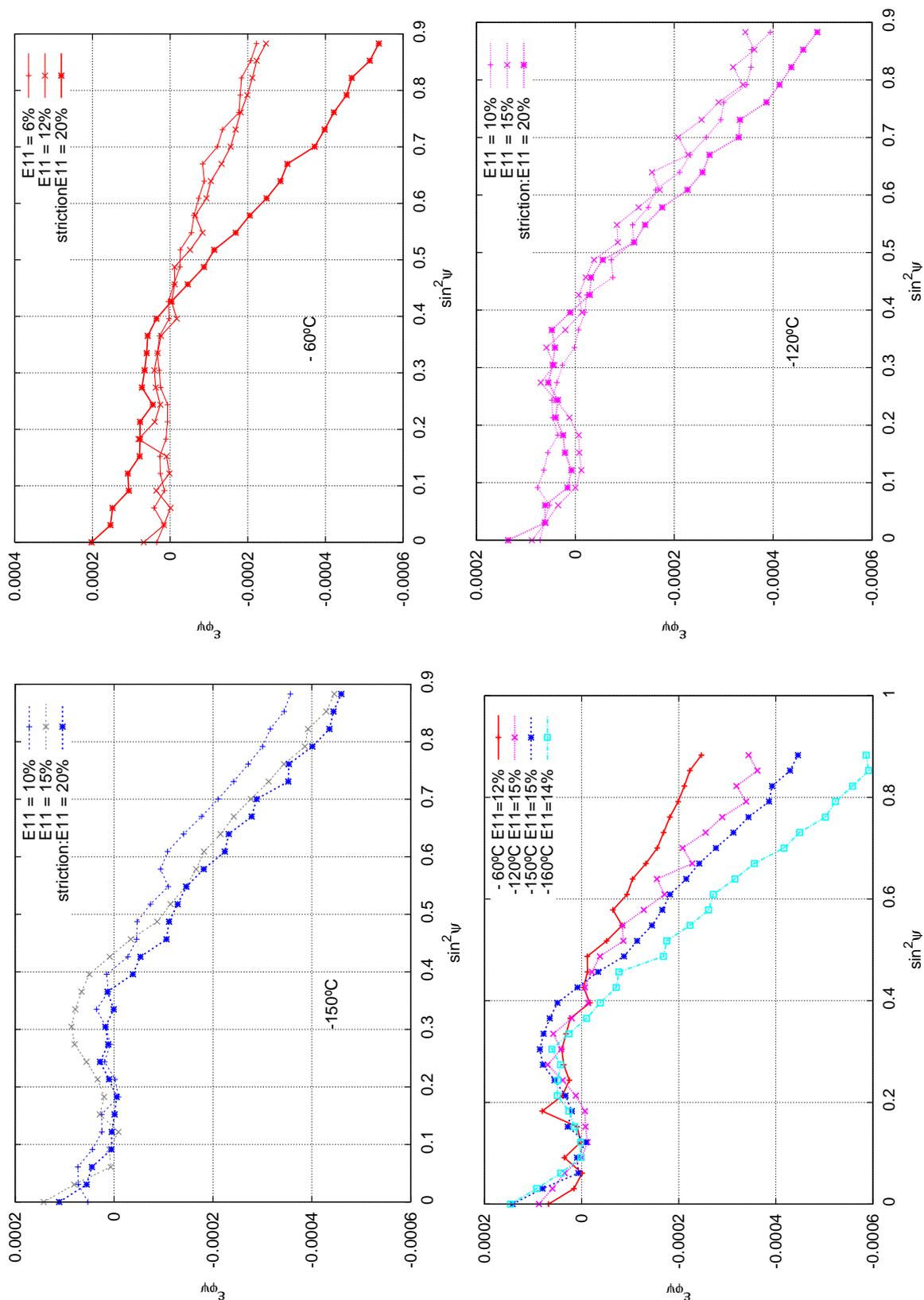


FIG. III.14 – Oscillations $\sin^2\psi$, présentées pour différentes températures et différents niveaux de déformations macroscopiques. Ces oscillations représentent les hétérogénéités de contrainte (i.e. de déformation élastique) dans la ferrite pour des mesures à différents angles ψ , dans la direction de traction ($\phi = 0^\circ$).

le réseau cristallin est orienté favorablement pour le clivage par rapport au chargement macroscopique et plutôt mal orienté pour la plasticité. L'orientation nommée B possède, à l'inverse, un système de glissement idéalement orienté pour déclencher la plasticité (figure III.15). Enfin L'orientation C est orientée selon une position intermédiaire, mais qui favorise plutôt l'apparition du glissement multiple.

Les résultats en termes de composantes du tenseur des contraintes résiduelles exprimées dans le repère de l'échantillon sont présentés au tableau III.1 et à la figure III.16. On note que les composantes 23, 31 et 33 du tenseur $\underline{\sigma}$ ont des valeurs négligeables par rapport à l'incertitude et sont donc considérées comme nulles.

Les différences de contraintes résiduelles entre les différentes orientations vont dans le même sens et sont à interpréter de la même façon que la différence de contrainte résiduelle entre ferrite et cémentite. On considère trois orientations de ferrite qui peuvent être classées par ordre de "dureté" apparente en fonction du chargement macroscopique décroissante : A, C, B. On retrouve une contrainte résiduelle de compression plus forte dans la phase la plus souple (B), la mieux orientée pour la plasticité. Les différences entre orientations peuvent atteindre 100 MPa, que ce soit pour la contrainte résiduelle dans la direction de traction, ou pour la contrainte dans la direction transverse. On rappelle qu'une des hypothèses utilisées ici pour la méthode des BDC est de considérer que la contrainte normale à la surface libre est nulle (ce qui sera discuté au chapitre suivant).

Dans l'ensemble, on constate sur la figure III.16.a) que les allures des variations de contraintes résiduelles de traction par orientation dans la ferrite en fonction de la température et de la déformation suivent celle de la contrainte macroscopique moyenne (obtenue par la méthodes des $\sin^2\psi$) qui a aussi été représentée. L'intensité des hétérogénéités, représenté sur les trois figures par l'écart vertical entre les surfaces représentant A et B (soit les deux extrêmes), suit la tendance des résultats d'oscillations. Elle augmente avec la déformation plastique : on passe d'un écart entre A et B de 60 MPa (pour 10% de déformation) à 90 MPa (pour 20% de déformation) pour la contrainte résiduelle de traction à -150°C . Elle augmente aussi avec la température : on passe d'un écart entre A et B de 90 MPa (pour -150°C) à 75 MPa (pour -120°C) pour cette même contrainte à 15% de déformation.

Les résultats en contrainte résiduelle dans la direction transverse, présentés à la figure III.16.b) sont tout à fait comparables à ceux obtenus dans la direction de traction, à la fois en terme de tendance vis-à-vis de la température et vis-à-vis de la déformation plastique.

Parmi les trois orientations, seule l'orientation B possède une contrainte résiduelle de cisaillement dans le plan de l'éprouvette (jusqu'à 170 MPa, figure III.16.c). Cela ne peut pas être uniquement lié au facteur de Schmid apparent, car l'orientation C serait dans ce cas elle aussi chargée en cisaillement (or la valeur de contrainte de cisaillement est toujours nulle pour cette orientation, sauf pour l'essai à 20% de déformation à -150°C). On mettra plutôt en cause la symétrie de l'orientation (visible sur les figures de pôles) : en effet, pour

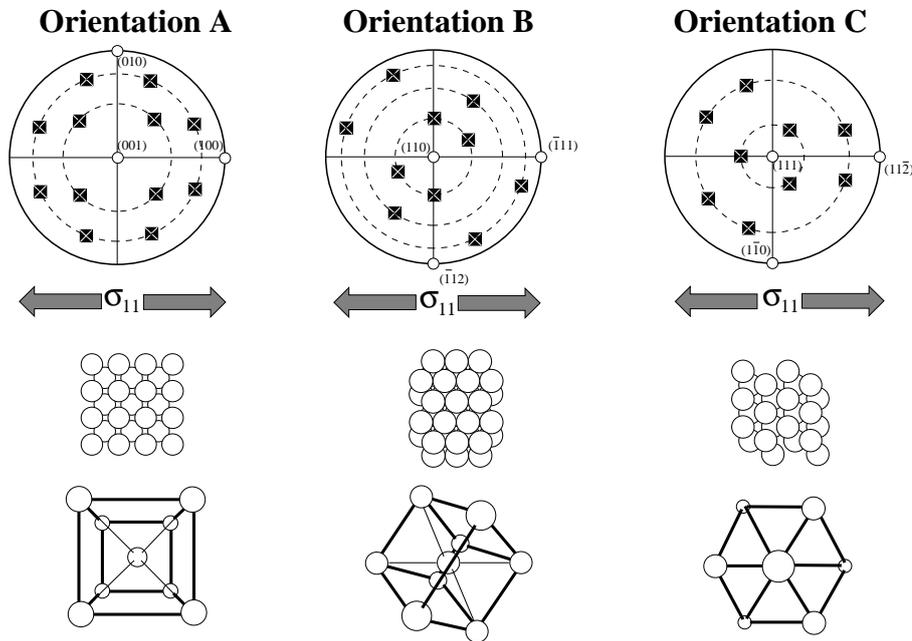


FIG. III.15 – Représentation des orientations choisies pour la méthode des BDC sur la ferrite : pour chaque orientation, la figure de pôles $\{112\}$ associée est représentée ainsi que les schématisations de la densité du réseau CC dans le plan de l'éprouvette, et de l'orientation de la maille.

Éprouvette		Orientation A			Orientation B			Orientation C		
T (°C)	$\epsilon_{11}^{max}(\%)$	σ_{11}^{res}	σ_{22}^{res}	σ_{12}^{res}	σ_{11}^{res}	σ_{22}^{res}	σ_{12}^{res}	σ_{11}^{res}	σ_{22}^{res}	σ_{12}^{res}
-150	20	-55	-35	40	-145	-110	125	-120	-95	25
-150	15	-50	-40	-5	-140	-125	130	-115	-95	0
-150	10	-45	-35	-5	-105	-90	95	-80	-60	0
-120	20	-55	-40	5	-160	-140	145	-135	-105	0
-120	15	-45	-40	-5	-120	-100	105	-85	-70	0
-120	10	-55	-35	0	-140	-120	125	-110	-80	0
-60	18	-90	-55	0	-190	-165	170	-185	-155	5
-60	12	-35	-50	5	-95	-80	80	-60	-95	5
-60	6	-35	-35	-5	-80	-70	70	-60	-70	0

TAB. III.1 – Contraintes résiduelles dans la ferrite déterminées pour différentes orientations par la méthode des BDC. Les résultats sont arrondis à 5 MPa près. L'incertitude ne dépasse jamais les ± 10 MPa

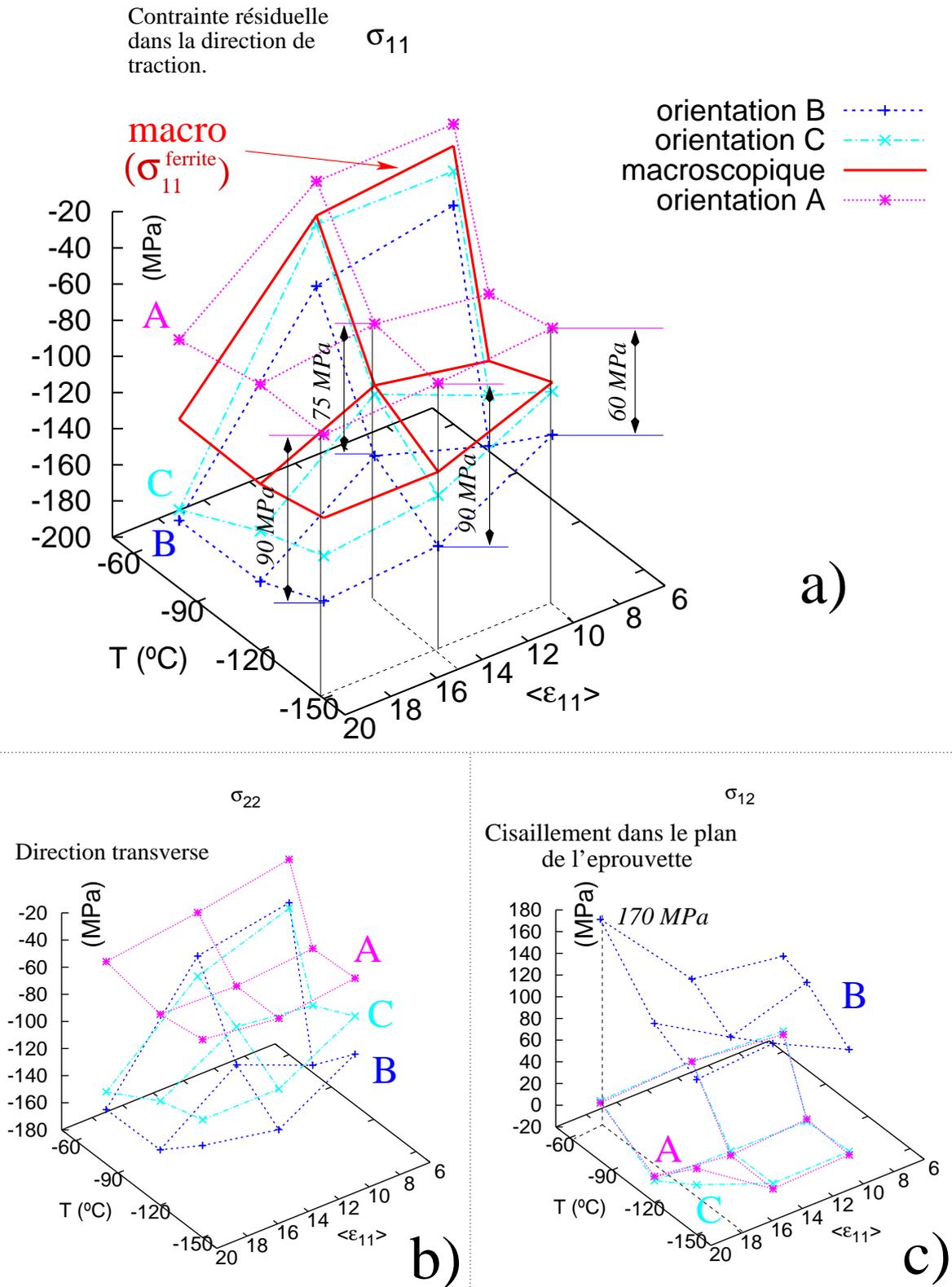


FIG. III.16 – Valeur des composantes du tenseur de contrainte résiduelle de la ferrite, exprimé dans le repère macroscopique, pour différentes orientations choisies, obtenues par la méthode des BDC. Chaque surface représente l'ensemble des essais à différentes températures et différents pour niveaux de déformations du tableau III.1 : a) direction de traction, b) direction transverse, c) composante de cisaillement.

les orientations A et C, la symétrie du réseau par rapport au chargement fait que lorsqu'un système de glissement peut s'activer, il en existe un, symétrique qui est lui aussi tout aussi susceptible de se déclencher (A et C favorisent le glissement multiple). Dans l'orientation B, seul un système est bien orienté pour glisser (B favorise le glissement simple), ce qui crée en cours de chargement une contrainte supplémentaire d'accommodation de cisaillement, qu'on retrouve en tant que contrainte résiduelle selon un mécanisme analogue à ce que l'on observe dans la direction de chargement entre phase dure et phase souple.

III.4 Discussion

Que ce soit pour les déterminations de contraintes résiduelles, ou pour les hétérogénéités entre orientations de la phase ferritique, les valeurs de différence de contrainte (jusqu'à 150 MPa entre ferrite et bainite) déterminées dans ces travaux sont moyennées sur l'ensemble du volume diffractant. Localement, il est possible que ces hétérogénéités soient bien plus fortes (le chapitre suivant sera l'occasion de revenir sur ce point).

L'apparition des oscillations en décharge, qui ne s'explique pas complètement par la formation d'une légère texture de traction en cours d'essai, est une caractéristique de la déformation plastique du matériau bainitique.

Ces oscillations sont à attribuer aux hétérogénéités de déformation plastique entre les diverses orientations de la matrice polycristalline, elles-mêmes exacerbées par la forte limite d'élasticité du matériau. L'hétérogénéité de déformation plastique, et donc d'écrouissage, donne en charge (puis en décharge) une hétérogénéité de contrainte (i.e de déformation élastique). Celle-ci est plus facilement mise en évidence par la DRX en décharge. On y verra finalement une représentation valable et assez facilement accessible des hétérogénéités de contrainte intergranulaires en cours de déformation.

Enfin, on constate que les tendances pour les hétérogénéités de contraintes macroscopiques déterminées par la méthode des $\sin^2\psi$ sont confirmées par les déterminations par orientation données par la méthode des BDC. Cela paraît normal puisque ces deux méthodes sont basées sur des hypothèses et des méthodologies très semblables. On effectue plusieurs mesures dans une direction pour déterminer la projection moyenne du tenseur des contraintes pour les différentes orientations dans la méthode des $\sin^2\psi$. Des mesures dans les directions appropriées pour prendre en compte majoritairement l'orientation désirée permettent de remonter au tenseur des contraintes pour la seconde. La seule différence réside en fait au niveau des volumes diffractants choisis pour mesurer les positions des pics de diffraction.

Une autre remarque concerne les BDC : ceux-ci fournissent avant tout une tendance. Seule leur utilisation dans le cadre de l'analyse monocristalline (matériaux à gros grains) garantit que le tenseur des contraintes déterminé correspond exactement à l'orientation choisie. En effet des plans en position de diffraction, mais pas forcément associés à

l'orientation choisie peuvent biaiser légèrement la position des pics de diffraction. Toutefois on constate bien que ces méthodes expérimentales sont à même de fournir des informations pertinentes sur la quantification des hétérogénéités de contrainte.

Il a déjà été démontré la capacité des modèles d'homogénéisation à champ moyens à reproduire les oscillations par simulation sur un nombre suffisant de grains [Krier, 1993, Inal et al., 2004], mais pour des matériaux texturés. Il serait intéressant dans les travaux de modélisation du comportement à froid de vérifier que la représentation choisie est à même de reproduire ces hétérogénéités.

En conclusion

- *L'observation au MEB in-situ et post-mortem d'éprouvettes sollicitées à très basses températures a permis de montrer deux sources principales d'hétérogénéités des champs mécaniques que sont les effets des amas de carbures résumés ici sous le terme d'effet "composite", qui viennent s'ajouter à l'effet "polycristal", dû à la nature polycristalline de la matrice ferritique.*
 - *L'utilisation lors d'essais in-situ de la DRX a permis de quantifier en moyenne par phase les hétérogénéités dues à l'effet composite, qui peuvent induire une différence de charge atteignant 150 MPa entre matrice ferritique et bainite. Par ailleurs, les contraintes résiduelles présentes dans la ferrite après décharge pour des éprouvettes sollicitées à différentes températures et niveaux de déformation ont été déterminées. Elles augmentent avec la déformation et avec la baisse de la température de sollicitation.*
 - *La méthode des $\sin^2\psi$ fait apparaître dès le début de la déformation plastique des oscillations de la courbe $\epsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$, qui ne sont pas dues à une forte texture, mais aux hétérogénéités plastiques amplifiées par la forte limite d'élasticité, et qui permettent de caractériser qualitativement l'effet "polycristal".*
 - *La méthode des BDC permet de mettre en évidence des hétérogénéités de contraintes résiduelles en moyenne par orientation de la matrice ferritique. La différence de contrainte peut atteindre 100 MPa en moyenne dans la direction de traction entre les différentes orientations.*
-

Bibliographie

- [Belassel, 1994] BELASSEL M. (1994). *Etude de la distribution des contraintes d'ordres I et II par diffraction des rayons X dans un acier perlitique*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- [Inal, 1996] INAL K. (1996). *Etude de l'hétérogénéité des contraintes résiduelles et appliquées dans un acier austéno-ferritique - Modélisation polycristalline et analyse expérimentale par diffraction des rayons X*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay.
- [Inal et al., 2004] INAL K., LEBRUN J.-L., ET BELASSEL M. (2004). *Second-Order Stresses and Strains in Heterogeneous Steels : Self-Consistent Modeling and X-Ray Diffraction Analysis*. Metallurgical and Material Transactions A, vol. 35A, pp 2361–2369.
- [Krier, 1993] KRIER J. (1993). *Influence des hétérogénéités élastoplastiques sur les contraintes du deuxième ordre dans les polycristaux métalliques mono- et polyphasés : calculs autocohérents - Mesures par diffraction des rayons X*. Thèse de Doctorat, Université de Metz.
- [Pesci, 2004] PESCI R. (2004). *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Renevey, 1998] RENEVEY S. (1998). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay - CEA.
- [Sekfali, 2004] SEKFALI S. (2004). *Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.

Chapitre -IV-

Comportement multi-échelles

Sommaire

IV.1	Comportement de la ferrite : étude bibliographique des modélisations	74
IV.1.1	Introduction : les échelles inférieures	74
IV.1.2	Élasticité	76
IV.1.3	Composante anélastique de la déformation	77
IV.1.4	Description de la plasticité cristalline	79
IV.1.5	Description de l'écrouissage	82
IV.2	Les méthodes d'homogénéisation	85
IV.2.1	Le passage micro-macro : une prise en compte des microstructures	85
IV.2.2	Notions fondamentales - notations	88
IV.2.3	Modèles de transition d'échelles analytiques	91
IV.2.4	Le calcul de microstructures par éléments finis.	96
IV.3	Choix des modèles et hypothèses	104
IV.3.1	La stratégie de modélisation : une approche multi-échelle . . .	104
IV.3.2	Le monocristal de ferrite	106
IV.3.3	Le composite ferrite-cémentite	107
IV.3.4	L'agrégat polycristallin	109
IV.3.5	La procédure d'identification et d'optimisation des paramètres	112
IV.4	Identification du comportement : validation des résultats	114
IV.4.1	Modélisation de l'effet "Composite"	116
IV.4.2	Modélisation à l'échelle de l'agrégat	128
IV.4.3	Comparaison avec la DRX, validation de la représentation de l'effet "polycristal"	138
	Bibliographie	145

Introduction

La caractérisation expérimentale de la microstructure et des hétérogénéités mécaniques étant achevée, on présente la mise en place d'une modélisation multi-échelles, capable de rendre compte de ces hétérogénéités. Elle se doit d'être adaptée à l'utilisation postérieure dans une démarche de mécanique de la rupture basée sur la prise en compte d'un critère local de clivage.

Cela passe d'abord par l'étude bibliographique qui permet de rappeler les moyens classiquement mis en oeuvre pour décrire le comportement plastique de la ferrite, puis par celle des méthodes permettant de réaliser la transition entre échelles de représentation.

Les solutions les plus appropriées au problème posé sont ensuite choisies. La démarche multi-échelles de modélisation est proposée, en prenant bien soin de valider les résultats de cette démarche à chaque étape (i.e. échelle) de représentation.

Enfin, la comparaison avec l'expérience permet de s'assurer qu'au-delà de la complexité de la démarche de modélisation, on reproduit bien le comportement macroscopique et l'effet "composite". Une démarche originale permet en outre de s'assurer que l'effet "polycristal", représenté par les oscillations des courbes $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$ et représentatif des hétérogénéités de contraintes inter-granulaires présentes au sein de la ferrite est bien reproduit.

IV.1 Comportement de la ferrite : étude bibliographique des modélisations

IV.1.1 Introduction : les échelles inférieures

On a déjà évoqué que la plasticité des métaux est associée au mouvement des dislocations sous l'effet des diverses sollicitations. Une modélisation à proprement parler du mouvement des dislocations est le cadre d'approches purement microscopiques telles que les simulations de dynamique moléculaire ou, à une échelle supérieure, de dynamique des dislocations ¹. Celles-ci ne permettent à l'heure actuelle que la description de phénomènes relativement locaux, puisqu'elles demandent des moyens de calcul numérique très importants. La nature des phénomènes étudiés sera bien évidemment liée à cette puissance de calcul.

¹L'élément de discrétisation est l'atome en simulation de dynamique moléculaire, et le segment de dislocation en dynamique des dislocations.

A l'heure actuelle, les simulations atomistiques en plasticité permettent de décrire le mouvement d'une dislocation [Vitek et al., 2004], voire ses interactions avec une autre dislocation [Tang et al., 1998, Rodney et Philipps, 1999] ou tout autre perturbation du réseau [Ostesky et al., 2005], et concernent des volumes petits (de l'ordre de $10^{-12} \mu\text{m}^3$), considérés sur de faibles intervalles de temps, et à une température constante. Par exemple, on étudie l'effet d'un indenteur en début de nano-indentation [Li et al., 2002], en se limitant aux premières formations de dislocations.

A l'échelle supérieure, la dynamique des dislocations permettra l'étude de phénomènes plus complexes, en ne considérant non plus les potentiels inter-atomiques, mais bien les interactions élastiques entre segments de dislocations. L'effet de la nano-indentation peut ainsi être étudié sur un intervalle de temps plus long et sur un volume plus conséquent que précédemment [Fivel et al., 1998]. La démarche peut aussi être validée par l'échelle inférieure, en vérifiant par exemple qu'un phénomène modélisable aux deux échelles (comme la jonction entre lignes de dislocations) prévu en dynamique moléculaire est correctement reproduit par la dynamique des dislocations [Rodney et Philipps, 1999].

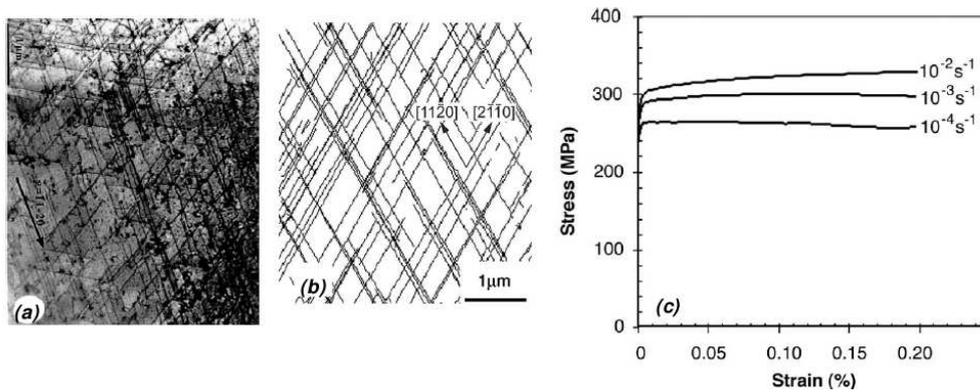


FIG. IV.1 – Résultats obtenus en dynamique des dislocations discrètes [Monnet et al., 2004] : (a) Microstructure de dislocations observée au MET sur un polycristal de Zr après déformation plastique de 2% à 300 K. (b) Microstructure de dislocations simulée en dynamique des dislocations discrètes dans les mêmes conditions. (c) Prédiction de la différence de cission critique résolue pour différentes vitesses de déformation à 300 K.

En augmentant encore le volume étudié, on peut finalement étudier les interactions de centaines de dislocations au sein d'un même volume [Monnet et al., 2004], voire les interactions de ces dislocations avec les obstacles du réseau (interstitiels, boucles d'irradiation), décrivant ainsi explicitement les phénomènes d'écrouissage. On peut ainsi expliquer l'influence de la vitesse de sollicitation ou de la température sur la cission critique résolue, comme illustré sur la figure IV.1, dans le cas du zirconium.

Dans le cadre de cette étude, où les volumes considérés seront plutôt de l'ordre de $10^8 \mu\text{m}^3$, l'approche utilisée sera celle de la mécanique des milieux continus, avec mise

en place de modèles de comportement à variables internes. L'élément de discrétisation est maintenant un élément de volume.

IV.1.2 Élasticité

Toutes les modélisations envisagées ont pour fondement la décomposition de la déformation totale en une partie élastique et une partie plastique.

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p \quad (4.1)$$

Nous utiliserons une élasticité de symétrie isotrope ou cubique dans le repère du monocristal, selon les cas d'étude. Dans tous les cas, les valeurs des coefficients permettant de caractériser l'élasticité seront pris dans la littérature. L'élasticité à symétrie cubique se caractérise par trois coefficients indépendants que nous prendrons identiques à ceux utilisés par Pesci [Pesci, 2004].

$$\begin{array}{l} \text{Élasticité isotrope} \\ \text{Élasticité de symétrie cubique} \end{array} \quad \begin{array}{l} E = 210 \text{ GPa}, \quad \nu = 0,3 \\ \left\{ \begin{array}{l} C_{11} = 237,4 \text{ GPa} \\ C_{12} = 134,7 \text{ GPa}, \\ C_{44} = 116,4 \text{ GPa} \end{array} \right. \end{array} \quad (4.2)$$

Bugat [Bugat, 2000] a démontré que l'on pouvait utiliser l'hypothèse de l'élasticité isotrope pour les monocristaux cubiques centrés, ce qui ne change que peu les résultats obtenus en plasticité cristalline, à tout le moins au niveau des résultats de comportement du polycristal. L'élasticité isotrope n'est néanmoins pas complètement équivalente à l'élasticité cubique, et elle peut diminuer lors du chargement la dépendance locale du moment d'entrée en plasticité par rapport à l'orientation du monocristal. En effet, dans le cas du chargement d'un agrégat multicristallin simulé par modélisation aux éléments finis, la prise en compte pour l'élasticité de la symétrie cubique introduit un premier niveau d'hétérogénéité de contrainte lors de la déformation élastique dû à l'effet de voisinage entre grains et à l'anisotropie élastique. Cela influe sur l'entrée en plasticité et crée une sur-contrainte locale aux joints des grains.

Quel que soit le type d'élasticité utilisé, la relation entre contrainte et déformation élastique s'écrit :

$$\sigma_{ij} = \sum_{k=1,3} \left(\sum_{l=1,3} C_{ijkl} \times \varepsilon_{kl}^e \right) \quad (4.3)$$

L'écriture des formules qui suivent utilisera la convention d'Einstein de sommation sur les indices inférieurs répétés en notation indicielle. Ainsi l'équation (4.3) deviendra :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^e \quad (4.4)$$

Toutes les relations exprimées dans cette partie le seront dans le repère du monocristal. Notons que pour toutes les modélisations envisagées, le formalisme sera celui des petites

déformations, étant donné les niveaux de déformation envisagés. Des éléments concernant le formalisme en grandes déformations pourront être trouvés dans [Besson et al., 2001a]. Son utilisation permet notamment une meilleure description de la rotation de réseau cristallin [Tabourot, 1992], et devient indispensable pour les forts niveaux de déformation (étude de la mise en forme prenant en compte la plasticité cristalline, par exemple).

IV.1.3 Composante anélastique de la déformation

a) Quelles variables internes ?

Un des moyens envisagés pour décrire la déformation plastique du monocristal par glissement est sa décomposition en une somme de contributions sur chacun des systèmes de glissement évoqués au paragraphe b), ce qui permettra de décrire plus précisément le comportement qu'en utilisant une loi purement phénoménologique liant déformations et contraintes globales [Lipinski, 1992]. Cette approche, dénommée approche "micromécanique" se justifie notamment par les bons résultats qu'elle donne lorsqu'on la confronte, par exemple, aux techniques expérimentales classiques d'essais mécaniques, ainsi qu'à celles permettant d'atteindre des informations à des échelles plus fines ou plus locales telles que la DRX [Krier, 1993].

Une alternative intéressante pour allier une bonne représentation physique des phénomènes d'érouissage à la possibilité de prise en compte d'effets plus complexes entre les structures de dislocations, est d'utiliser non plus le taux de glissement sur chaque système comme variable interne, mais des densités de dislocations. On se référera notamment aux travaux de Franciosi [Franciosi, 1984, Franciosi, 1985]. Ce type d'approche a été utilisé dans de nombreux travaux comme par exemple les travaux de thèse de Berbenni [Berbenni, 2002]. Elles font appel aux densités de dislocations d'accommodation géométrique, et aux densités de dislocations statistiquement distribuées [Kelly et Nicholson, 1971].

Leur intérêt peut parfois tenir à l'utilisation de quantités obtenues expérimentalement, par observations au MET pour les distances entre structures de dislocations (bandes de glissements, murs), ou bien en dynamique des dislocations afin de rester dans un cadre de modélisation le plus représentatif possible de la physique de l'échelle inférieure. Il n'est pourtant pas possible à ce jour de s'affranchir des procédures classiques d'identification des paramètres des modèles.

Un autre avantage tiendra à ce qu'elles permettent de prendre en compte les effets de longueurs internes des matériaux (notion de libre parcours des dislocations), pour décrire, par exemple, les effets classiques de type Hall-Petch de manière implicite. On pourra aussi mieux rendre compte des trajets de chargement complexes, et de leurs effets sur la microstructure [Roy et Acharya, 2006].

Pour les matériaux de structure cubique centré, et notamment l'acier 16MND5, ce type d'approche peut aussi permettre de prendre en compte les différents mécanismes

de déformation. Rappelons en effet que si les aspects microscopiques de la déformation plastique des CFC par glissement plastique sont relativement bien connus, il n'en est pas de même pour les CC. Les observations récentes d'échantillons de 16MND5 déformés à très basse température (-196°C) tendent à confirmer l'hypothèse d'une déformation par mécanisme de double décrochement des segments vis des dislocations (voir figure II.11 [Obtlik et al., 2006]). Un modèle développé au CEA permet d'ailleurs de prédire le comportement de diverses bainites à différentes températures, en se basant sur ces observations [Libert, 2006].

Dans un but de simplification, et ne disposant à l'heure actuelle d'aucune donnée suffisante pour envisager l'utilisation de ce type de modélisations, nous les écartons¹. Une description plus phénoménologique est utilisée. Celle-ci est déjà largement décrite dans la littérature, et s'avère adaptée à une approche micromécanique de la déformation plastique des CC. La tendance actuelle est toutefois clairement au dialogue entre les différentes échelles de représentation, ce qui passe aussi bien par des approches découplées (calculs à l'échelle inférieure donnant en sortie des constantes utilisables à l'échelle supérieure), que par des approches couplées (calcul de mécanique des milieux continus avec une partie du maillage remplacée par une boîte de simulation de dynamique moléculaire par exemple, voir notamment [Knap et Ortiz, 2001]). Cette seconde méthodologie est plus ardue à mettre en oeuvre pour des raisons évidentes de compatibilité au niveau des conditions aux limites. Une revue synthétique des aspects de plasticité cristalline à différentes échelles de modélisation est disponible dans la littérature [Fivel et Forest, 2004].

b) Approche phénoménologique du glissement

La déformation plastique est donc définie comme la somme, sur chacun des 24 systèmes (12 systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{110\}$, et 12 systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{112\}$), des glissements projetés par le tenseur R des directions de déformation aussi appelé tenseur des facteurs de Schmid (équation 4.6). Si n^g est le vecteur unitaire normal au plan de glissement du système g et m^g le vecteur unitaire de la direction de glissement de ce système (figure IV.2), on définit ce tenseur comme suit :

$$R_{ij}^g = \frac{1}{2}(m_i^g n_j^g + m_j^g n_i^g) \quad (4.5)$$

Il vient donc comme définition de la déformation plastique :

$$\varepsilon_{ij}^p = \sum_{g=1}^{24} \gamma^g R_{ij}^g \quad (4.6)$$

γ^g représentant le glissement sur le système g . De la même façon, comme l'a établi Schmid, la cisssion résolue sur le système considéré obéira à la même loi de projection pour le tenseur

¹Notons toutefois que les travaux actuellement menés chez EDF, dans le cadre du projet PERFECT, utilisent ces méthodes.

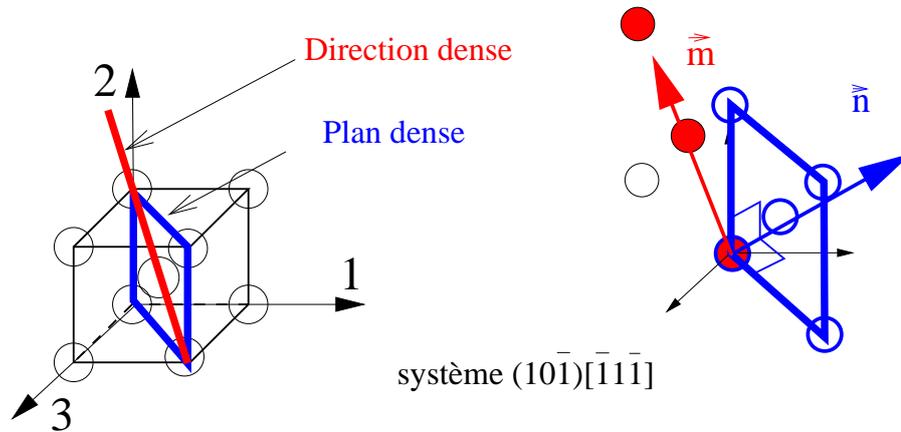


FIG. IV.2 – Les vecteurs associés aux systèmes de glissement. Exemple dans le cas d'un système de la famille $\{110\}\langle 111\rangle$.

des contraintes :

$$\tau^g = R_{ij}^g \sigma_{ij} \quad (4.7)$$

L'enjeu est bien évidemment de décrire par une loi phénoménologique l'évolution du glissement, et donc de la déformation plastique en fonction de la cission imposée et de l'historique de déformation du matériau.

IV.1.4 Description de la plasticité cristalline

a) Elastoplasticité à seuil

Cette approche a été formalisée de manière exacte par Franciosi et Zaoui [Franciosi et Zaoui, 1991]. Elle a été utilisée notamment dans les travaux de Pesci [Pesci, 2004].

Les systèmes de glissement sont considérés comme potentiellement actifs dès lors que la cission résolue atteint la valeur seuil de la cission critique τ_c^g :

$$\tau^g \geq \tau_c^g \quad (4.8)$$

avec :

$$\tau_c^g = \tau_{c_0}^g + \sum_{h=1}^{24} h^{gh} \cdot \gamma_{cum}^h \quad (4.9)$$

$$\gamma_{cum}^g = \int_{t_0}^t |\dot{\gamma}^g| \cdot dt \quad (4.10)$$

Dans cette description, on introduit une matrice d'écrouissage h^{gh} permettant de représenter l'effet durcissant d'un système de glissement sur lui-même et sur les autres systèmes. Le contenu de cette matrice (qui sera donc de dimension 24*24 dans notre cas) sera discuté plus avant. Celle utilisée dans les travaux précités fait état, pour un système

donné, d'une dépendance linéaire de la cission critique avec le glissement sur chacun des systèmes.

L'activité des systèmes est effective lorsque le potentiel plastique f^g respecte la condition d'écoulement de Schmid :

$$f^g = \tau_c^g - \tau^g \geq 0 \quad (4.11)$$

Il est nécessaire dès lors de sélectionner la combinaison de systèmes actifs. Cela passe par un tirage de toutes les combinaisons possibles des systèmes potentiellement actifs comme définis en (4.8), et pour chacune de ces combinaisons par :

1. Le calcul des vitesses de glissement potentielles pour les systèmes considérés (Systèmes Virtuellement Actifs (SVA)) :

$$\dot{\gamma}^l = (R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^q + h^{gq})^{-1} R_{mn}^g C_{mnop} \dot{\epsilon}_{op}^t \quad (4.12)$$

2. Le calcul d'un critère énergétique, dont la dérivée par rapport aux vitesses de glissement est le potentiel plastique :

$$w = \frac{1}{2} \sum_{q=1}^{SVA} \sum_{p=1}^{SVA} (h^{pq} + R_{mn}^p C_{mnop} R_{op}^q) \cdot \dot{\gamma}^p \cdot \dot{\gamma}^l - \sum_{q=1}^{SVA} R_{ij}^q C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^t \cdot \dot{\gamma}^l \quad (4.13)$$

La combinaison, solution du problème, est celle qui minimise le critère énergétique w . Cette combinaison connue, toutes les variables internes du problème sont réactualisées, et l'on passe à l'instant de calcul suivant.

Cette approche possède l'avantage de ne pas dépendre de la vitesse de chargement, contrairement aux approches avec faible viscosité qui seront présentées plus tard¹. Un autre avantage de cette méthode est de fournir directement un module élastoplastique exact directement utilisable dans une approche d'homogénéisation à chaque futur incrément de calcul :

$$l_{ijkl} = C_{ijkl} - C_{ijst} \sum_{q=1}^{24} \sum_{g=1}^{24} R_{st}^q (R_{mn}^g C_{mnop} R_{op}^q + h^{gq})^{-1} R_{ru}^g C_{rukl} \quad (4.14)$$

Un inconvénient majeur de cette approche est la lourdeur des calculs à effectuer. Tout d'abord, n'ayant pas un caractère continu, le problème ne pourra pas être traité de manière implicite. Le seul moyen d'obtenir un résultat approchant la solution exacte est de réduire au maximum le pas de temps du calcul. Pour la même raison, les approches d'intégration de type Runge-Kutta ne permettent pas d'augmenter la précision ou la rapidité des calculs.

S'ajoute à cela le fait qu'à chacun des incréments de temps, le calcul du critère énergétique, coûteux en termes numériques car nécessitant une inversion de matrice pour chacune des combinaisons de systèmes de glissement virtuellement actifs envisagés, rend

¹Bien que les résultats soient au final quasiment les mêmes, comme le montrent les résultats présentés à l'annexe A-IV.2.

finaleme nt le temps de calcul ré dhibitoire pour une utilisation de cette modélisation pour un calcul de structure par éléments finis.

Par contre, l'utilisation de cette approche dans un cadre plus raisonnable reste possible, comme cela a été fait dans les travaux de Pesci [Pesci, 2004] en envisageant une homogénéisation par transition d'échelle de type autocohérente sur des polycristaux (jusqu'à 5000 grains).

b) Viscoélastoplasticité à loi de type Hutchinson

L'introduction de la viscosité dans l'écriture du problème ne possède pas tant un caractère nécessaire pour décrire un quelconque phénomène physique dans la modélisation qui nous concerne (et certainement pas un caractère visqueux du matériau aux températures et vitesses de sollicitations considérées). Elle constitue un moyen simple de sélectionner les systèmes réellement actifs.

Tous les systèmes sont considérés actifs pendant la déformation ; on utilise ensuite une loi d'écoulement proposée par Hutchinson [Hutchinson, 1976] (aussi appelée loi puissance). L'expression des vitesses de glissement est alors donnée explicitement par :

$$\dot{\gamma}^g = \dot{\gamma}_0 \cdot \left\langle \frac{|\tau^g|}{\tau_c^g} \right\rangle^n \cdot \text{signe}(\tau^g) \quad (4.15)$$

Le taux de glissement ne prendra une valeur significative que pour les systèmes pour lequel $|\tau^g|$ est bien supérieure à τ_c^g grâce à une forte non-linéarité de l'expression 4.15

La notation τ_c^g n'est plus vraiment adaptée (l'indice c pour *critique* n'a plus lieu d'être puisque les systèmes sont activés dès le départ), mais nous la conservons car la valeur qu'elle représente est la même que celle utilisée dans le paragraphe précédent pour un même matériau. $\dot{\gamma}_0$ représente la vitesse de glissement de référence, et n la sensibilité à la vitesse de déformation.

On déduit de (4.6) la relation :

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum_{g=1}^{24} \dot{\gamma}^g R_{ij}^g \quad (4.16)$$

L'unique difficulté vient dès lors du fait que l'inconnue lors d'une approche incrémentale pilotée en déformation, à savoir l'état de contrainte, s'exprime en fonction d'elle-même dans la solution exacte déduite de (4.15).

$$\sigma_{ij}^{t+\Delta t} = \sigma_{ij}^t + C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}^t \cdot \Delta t - C_{ijkl} \cdot \dot{\gamma}_0 \sum_{g=1}^{24} R_{kl}^g \left(\frac{R_{pq}^g \sigma_{pq}^{t+\Delta t}}{\tau_{c_0}^g} \right)^n \cdot \Delta t \quad (4.17)$$

En première approximation, l'utilisation d'un découpage très fin du pas de calcul autorise une approche explicite, peu valable en termes de compromis vitesse de calcul-précision, mais tout de même plus "rapide" que la méthode par critère énergétique pour un résultat en glissements et en comportement quasi identique. En utilisant une méthode

d'intégration de type Runge-Kutta [Press, 1992], ou une formulation implicite, on arrive à une augmentation de la rapidité de calcul d'un facteur 50 pour un chargement monotone [Lorrain, 2005], ce qui montre bien l'économie de moyens numériques autorisée par l'introduction d'une faible viscosité. D'autres formulations axées sur une représentation thermodynamique de la plasticité et formulées pour une bonne efficacité numériques permettent d'envisager des simulations de plasticité cristalline sur des volumes importants [Anand, 2004] L'obtention d'un module élasto-viscoplastique exact n'est toutefois pas immédiate dans ce cas. On pourra éventuellement utiliser un module approché.

c) Viscoélastoplasticité à loi de type Norton

Ce type de loi a été utilisé dans de nombreux travaux concernant des métaux à comportement viscoplastique.

$$\dot{\gamma}^g = \left(\frac{|\tau^g| - \tau_c^g}{K} \right)^n \cdot \text{signe}(\tau^g) \quad (4.18)$$

La différence avec le modèle précédent tient à la formulation mathématique à deux paramètres qui permet de décrire des comportements visqueux plus complexes que l'expression 4.15. Bugat [Bugat, 2000] a utilisé cette formulation pour décrire la ferrite et l'austénite d'un austéno-ferritique vieilli à 320°C, mais celle-ci a été utilisée pour d'autres types de matériaux de nature cubique à faces centrées [Cailletaud, 1988, Méric et al., 1994, Barbe et al., 2001a], voire hexagonale compacte [Diard et al., 2005].

IV.1.5 Description de l'écrouissage

a) Ecrouissage isotrope

Cette forme d'écrouissage considère tout simplement une augmentation de la cission critique sur un système avec le glissement cumulé sur chacun des systèmes. Son expression dans les équations passe par une matrice d'interactions h^{rs} où sont introduits les effets durcissants des systèmes de glissement sur eux-mêmes (auto-écrouissage représenté par les valeurs diagonales de h^{rs}), et sur les autres systèmes (écrouissage latent). Cette formulation a été introduite par Mandel [Mandel, 1963]. Plusieurs expressions de cette matrice ont ainsi été proposées.

Cailletaud et Méric [Cailletaud, 1988, Méric et al., 1994] distinguent, pour les métaux de structure CFC, les termes diagonaux (auto-écrouissage) des autres, mais ils ne considèrent qu'une seule famille de glissements. Lorsque l'on considère les deux familles de systèmes de glissement du fer CC, une description plus fine est possible.

Les travaux de Lipinski [Lipinski, 1992], reprennent ainsi pour les matériaux de structure cubique centré l'idée introduite par Franciosi qu'un terme fort et un terme faible suffisent à décrire l'écrouissage de la ferrite. Ainsi, les interactions entre systèmes de

glissement coplanaires et/ou ayant une même direction de glissement se voient dotés d'un terme fort d'écrouissage, les autres gardant un terme faible :

- Terme faible : $H_1 = \mu/500$
- Terme fort : $H_2 = A \cdot H_1$ avec $A = 1, 1$

Hoc et Forest [Hoc et Forest, 2001], ont introduit dans leurs modélisations polycristallines d'un acier IF-Ti, une matrice d'écrouissage qui peut comporter jusqu'à huit termes d'écrouissage différents (tableau IV.1).

Interaction	$\{110\} \cap \{110\}$	$\{110\} \cap \{112\}$	$\{112\} \cap \{112\}$
auto-écrouissage	a_0		$k_{s0} \cdot a_0$
colinéaires	$k_1 \cdot a_0$	$k_{p1} \cdot a_0$	$k_{s0} \cdot k_1 \cdot a_0$
non colinéaires	$k_1 \cdot k_2 \cdot a_0$	$k_{p1} \cdot k_{p2} \cdot a_0$	$k_{s0} \cdot k_1 \cdot k_2 \cdot a_0$

avec $k_1 = 1, k_2 = 1.15, k_{p1} = 1.05, k_{p2} = 1.05$ et $k_{s0} = 1.3$

TAB. IV.1 – Les paramètres d'écrouissage utilisés dans [Hoc et Forest, 2001].

La façon de traduire les phénomènes d'écrouissage varie aussi dans la littérature, certains auteurs introduisant une cission critique linéairement dépendante du glissement cumulé [Lipinski, 1992, Pesci, 2004], alors qu'une saturation de l'augmentation de la cission critique peut être mise en place grâce à une loi de type exponentielle [Cailletaud, 1988, Méric et Cailletaud, 1991] :

$$\tau_c^g = \tau_{c0}^g + Q^g \sum_{h=1}^{24} h^{gh} \cdot (1 - e^{-b^g \cdot \gamma_{cum}^h}) \quad (4.19)$$

Le coefficient b^g représente ici la sensibilité du matériau à la saturation de ce système, et $Q^g \cdot h^{gh}$ l'augmentation maximale de cission critique sur le système g due à l'effet durcissant de la déformation sur le système h , là où les coefficients h^{gh} représentaient la pente de la courbe $(\gamma^h - \tau_c^g)$ précédemment. Dans le cas de chargements complexes ou aux fortes déformations, l'expression (4.19) permet une meilleure description du comportement du matériau de par la prise en compte de la saturation.

b) Ecrouissage cinématique

Cet ajout aux modélisations micromécaniques, introduit par Cailletaud et Méric [Cailletaud, 1988, Méric et Cailletaud, 1991], s'appuie sur une représentation phénoménologique de l'écrouissage des matériaux métalliques [Lemaitre J., 1993], reprise à l'échelle des systèmes de glissement. Rappelons que l'écrouissage cinématique se traduit macroscopiquement par le déplacement de la surface de plasticité dans le repère des contraintes principales. L'idée est donc d'appliquer la notion de cission effective $(\tau^g - x^g)$ sur un système afin de rendre compte des interactions à longue distance entre dislocations :

$$\begin{cases} \tau_{eff}^g = \tau^g - x^g \\ x^g = c\alpha^g \\ \dot{\alpha}^g = \dot{\gamma}^g - \frac{d}{c}|\dot{\gamma}^g| \end{cases} \quad (4.20)$$

d et c étant les paramètres permettant d'ajuster l'effet de la formulation.

Ce modèle est plus performant pour la description de l'effet Bauschinger, par exemple, lorsqu'on le confronte à un chargement cyclique. Cet effet se caractérise par l'abaissement du seuil de plasticité en chargement inversé.

Il semble enfin important de conclure en rappelant que le type de modélisation de plasticité cristalline envisagée ici n'est que la transposition à la structure CC du fer de ce que l'on connaît relativement bien pour les structures CFC. Cela malgré des phénomènes d'interactions entre systèmes pour les CC moins bien connus et dépendants de la température. On signale toutefois que ces aspects cristallisent de nombreux efforts de recherche actuellement, aussi bien en termes expérimentaux [Obtlik et al., 2006], qu'en termes de modélisation [Chaussidon et al., 2006].

IV.2 Les méthodes d'homogénéisation

La partie précédente a permis d'évoquer les méthodes utilisées pour décrire le comportement élastoplastique du monocristal à partir des connaissances en métallurgie physique. Cette description se heurte parfois aux difficultés de passage des échelles de représentation (atomes, dislocations, monocristal). Le passage du comportement microscopique des constituants au comportement macroscopique du matériau nécessite de la même façon l'utilisation de techniques dites d'homogénéisation.

IV.2.1 Le passage micro-macro : une prise en compte des microstructures

a) Deux approches à distinguer

Historiquement, les modèles se basant sur la notion d'inclusion, ou modèles que l'on qualifiera de "transition d'échelles" (qui incluent les Modèles à Champs Moyens (MCM)) ont ouvert la voie aux traitements de la question du passage du micro au macro.

Le prochain sous-chapitre tentera d'éclaircir la démarche qui a permis le développement de ces approches mathématiques, notamment pour les modèles utilisés au cours de ces travaux. Ces approches ont eu l'avantage d'être en adéquation avec des informations microstructurales qui pouvaient les nourrir au moment de leur essor (forme et orientation des phases, distribution des orientations), facilement accessibles, par exemple, en caractérisation par DRX. Ces techniques restent à l'heure actuelle le meilleur compromis pour le mécanicien en termes de rapport entre moyen de calcul à mettre en oeuvre et richesse des données accessibles.

L'introduction de ce type de modèle de comportement en lieu et place des lois de comportement phénoménologiques plus classiques pour des applications en calcul de structures macroscopiques a démontré des apports concernant la prise en compte d'effets locaux d'endommagement au sein, par exemple, d'un composite [Carrere, 2001]. De même on peut envisager de les utiliser pour affiner la construction d'un modèle de comportement phénoménologique comme il a été fait dans les travaux de Kubler portant sur les aciers à transformation martensitique [Kubler, 2004]. Leur utilisation a aussi été envisagée dans des approches de mécanique de la rupture pour les aciers bainitiques [Lambert-Perlade, 2001, Pesci, 2004]. Notons toutefois que l'hypothèse des champs moyens peut poser des problèmes dans ces derniers cas, pour l'application de critères de rupture fragile.

Par ailleurs, l'augmentation des puissances de calculs disponibles a rendu possible une autre approche, plus "démonstrative" que les modèles de transition d'échelles analytiques, que l'on qualifiera d'homogénéisation par éléments finis. Cette démarche aussi dénommée "calcul de microstructure" est actuellement en plein essor, et l'on trouvera un aperçu des possibilités et développements récents dans [Forest et al., 2002].

Avec cette méthodologie, on choisira de représenter explicitement au travers du maillage la microstructure des matériaux, en maillant les constituants et en leur attribuant leur comportement microscopique local. On augmente donc intuitivement le coût numérique, ce qui ne permet donc généralement que la représentation d'un élément de volume plutôt que d'une structure, bien qu'il existe des exceptions pour certaines structures dont la taille est raisonnable en regard de la taille de grains.

b) Aspects expérimentaux associés

Par ailleurs, les progrès en matière de caractérisation des matériaux permettent une représentation toujours plus précise des morphologies des microstructures. Les techniques de microtomographie aux rayons X aux grands instruments permettent de mettre en évidence la structure tridimensionnelle de matériaux au contraste entre phases suffisant, comme par exemple dans le cas de biphasés zircone-verre, illustré à la figure IV.3.1 [Forest et al., 2006].

Pour les matériaux polycristallins tels que les aciers, la tomographie est envisageable. Ainsi, on peut mettre en évidence la morphologie de la microstructure en mouillant un échantillon avec du gallium liquide ce qui permet de mettre en évidence les joints de grains toujours par contraste de masse atomique. Par contre, seules les orientations cristallographiques de surface sont accessibles (par EBSD), aucune technique ne permettant à l'heure actuelle ce type de mesure dans la masse pour des tailles de grains aussi petites que celle de l'acier 16MND5. Un résultat de ce type est présenté à la figure IV.3.2 [About et al., 2003].

Les travaux récents de Alpers *et al.* [Alpers et al., 2006] qui utilisent un algorithme de reconstruction tridimensionnel basé sur la DRX en rayonnement synchrotron focalisé laissent toutefois entrevoir de nombreuses améliorations. La technique permet de déterminer l'orientation du réseau cristallin dans la masse. Si pour l'instant, elle ne permet pas d'atteindre une résolution inférieure à $1 \times 5 \times 5 \mu\text{m}^3$, l'installation du détecteur "Nanoscope" au sein de l'European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) permet d'envisager une résolution de l'ordre de $0,1 \times 0,1 \times 0,1 \mu\text{m}^3$. Par ailleurs, on peut aussi accéder à l'état de contrainte dans le volume avec ces méthodes [Poulsen, 2006].

Une solution alternative plus accessible est la reconstruction couche par couche d'un échantillon, en alternant séances de polissage et cartographies EBSD [Rey et al., 2006], ce qui présente l'inconvénient de détruire l'échantillon, et par ailleurs, d'être assez fastidieux, bien que là aussi, des progrès soient à espérer avec l'émergence des techniques d'érosion ionique des échantillons in situ.

Une dernière possibilité est de s'appuyer sur une détermination des informations concernant la microstructure concernée (taille et morphologie des grains, orientations cristallographiques...), afin de générer une microstructure synthétique. Cette démarche qui est celle retenue dans ces travaux sera exposée dans la dernière partie de ce chapitre.

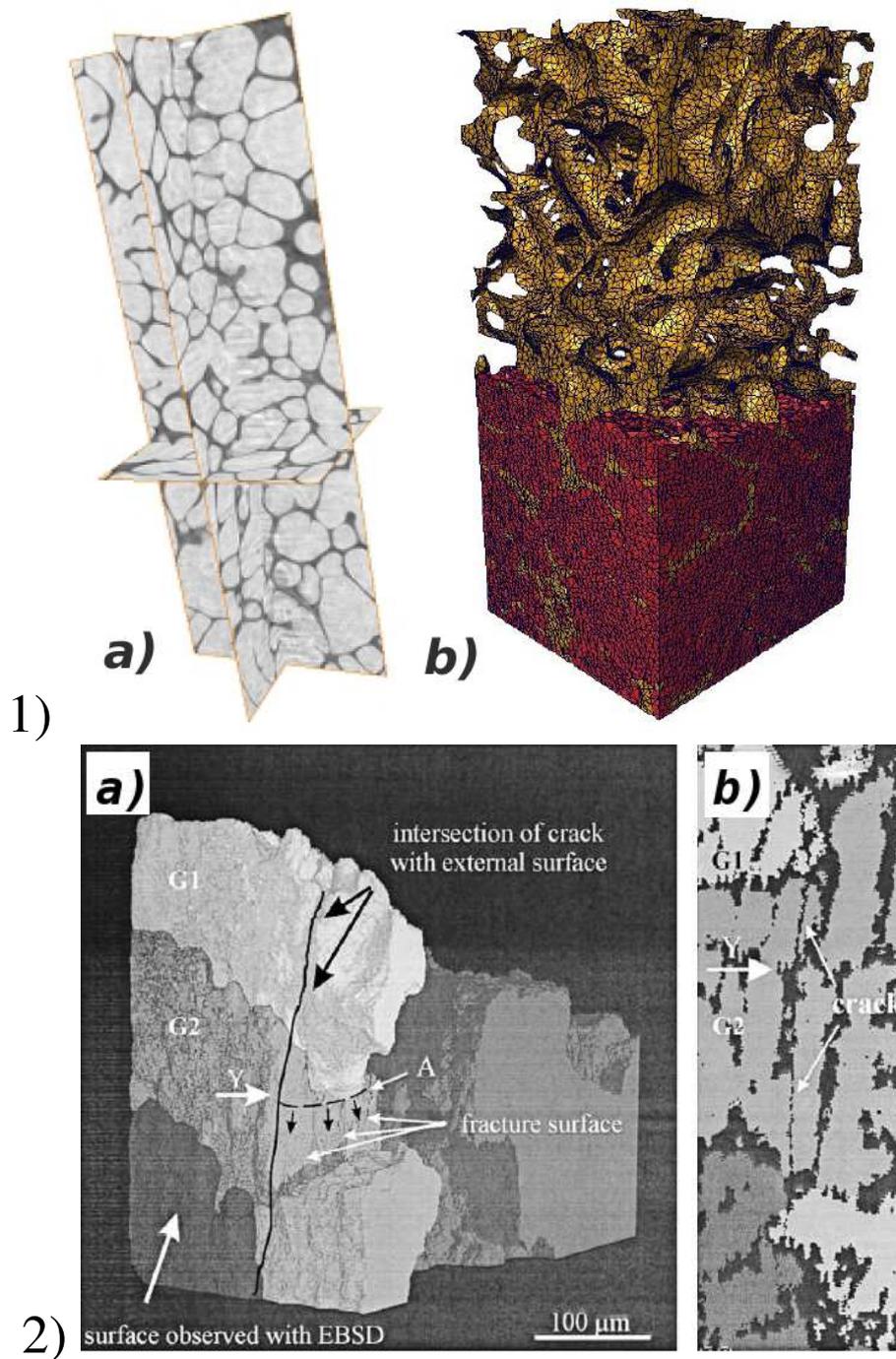


FIG. IV.3 – Deux microstructures caractérisées par tomographie : 1) microstructure d'un réfractaire électro-fondu zircon-verre : a) Trois coupes obtenues par microtomographie aux rayons X. b) Maillage par éléments finis correspondant (zircon en rouge, verre en jaune). [Forest et al., 2006]. 2) a) Rendu 3D de la structure de grains d'un alliage d'aluminium fissuré par fatigue. La partie droite du grain G2 est "transparente" pour une visualisation de la fissure. b) Cartographie EBSD de la surface permettant la détermination des orientations. [Babout et al., 2003]

IV.2.2 Notions fondamentales - notations

a) Définition des phases

L'idée sous-jacente étant la prise en compte des hétérogénéités qui apparaissent au sein des matériaux en cours de sollicitation, telles que celles observées au paragraphe III.3.2, il est nécessaire de définir un volume de discrétisation sur lequel on considère que l'état mécanique (variables internes y compris) est homogène. On dénomme souvent ce volume comme une "phase" dans le cadre des modèles de transition d'échelles. Toutefois ce terme précis est par abus de langage employé aussi bien pour distinguer les phases métallurgiques à proprement parler (par exemple ferrite et cémentite dans le cas du 16MND5), que chaque groupe de grains d'une même orientation au sein d'un polycristal. Dans le cas de certains modèles, on dénommera phases des parties d'un même constituant (joints de grains et intérieur des grains) qui ont chacune des caractéristiques différentes. Cela permet de prendre en compte un premier niveau d'hétérogénéités en divisant la "phase métallurgique" en différentes "phases de représentation" [Bornert et al., 2001a].

Dans le but d'alléger les écritures, les notations indicielles seront abandonnées dans cette partie au profit des notations tensorielles. Par convention, on désignera par :

s	un scalaire
\underline{v}	un vecteur de composantes v_i
$\underline{\underline{t}}$	un tenseur d'ordre 2 de composantes t_{ij}
$\underline{\underline{\underline{M}}}$	un tenseur d'ordre 4 de composantes M_{ijkl}

b) Le Volume Élémentaire Représentatif (VER)

Cette autre notion essentielle aux approches micro-macro (qu'elles soient à base de transition d'échelles ou d'éléments finis), représente le volume macroscopique incluant un ensemble de phases, et duquel on tentera de déduire le comportement effectif à partir des comportements individuels de ces mêmes phases. Une définition possible de ce VER passe par son caractère représentatif effectif pour une propriété donnée : bien qu'au sein du VER, cette propriété puisse varier localement, le VER aura globalement une propriété effective indépendante des conditions aux limites et du choix de sa position [Bornert et al., 2001a].

On désignera comme :

$\underline{\underline{\underline{\sigma}}}^n$ et $\underline{\underline{\underline{\varepsilon}}}^n$	respectivement la contrainte et la déformation dans une phase n .
$\underline{\underline{\underline{\Sigma}}}$ et $\underline{\underline{\underline{E}}}$	respectivement la contrainte et la déformation sur le VER (soit moyennées sur l'ensemble du volume considéré, soit les contrainte et déformation macroscopiques du VER dans le cas où le lemme de Hill-Mandel est respecté).

En considérant des conditions de contrainte et/ou de déformation homogène au contour du VER (champs macroscopiques), on peut appliquer le lemme de Hill-Mandel, qui lie la contrainte $\underline{\Sigma}$ et la déformation $\underline{\mathbf{E}}$ sur le VER à la moyenne sur le volume des contraintes et déformations locales (i.e. aux grandeurs microscopiques) :

$$\text{et } \left\{ \begin{array}{l} \underline{\mathbf{E}} = \langle \underline{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle_{VER} = \langle \underline{\boldsymbol{\varepsilon}}^n \rangle_{VER} \\ \underline{\Sigma} = \langle \underline{\boldsymbol{\sigma}} \rangle_{VER} = \langle \underline{\boldsymbol{\sigma}}^n \rangle_{VER} \end{array} \right. \quad (4.21)$$

où l'opérateur $\langle \rangle_V$ désigne l'opération de moyenne sur le volume V considéré.

Une des premières difficultés de la méthode tient au choix de ce VER, qui devra être une partie de la structure macroscopique à étudier, suffisamment grande pour être représentative, mais aussi assez petite pour que la discrétisation de la structure (et donc l'hypothèse du comportement homogène du VER) ne soit pas pénalisante. C'est la notion de "séparation des échelles" qui prévaut et l'on pourra se référer à l'explication donnée dans [Bornert et al., 2001a] pour plus de détails. L'étape qui consiste à définir les phases et le VER est dénommée l'étape de représentation.

c) Le Milieu Homogène Équivalent

Une fois le VER défini, il est remplacé dans le calcul de structure par un Milieu Homogène Équivalent (MHE), au comportement supposé homogène (bien que tenant compte des hétérogénéités de comportement des phases au travers de la démarche d'homogénéisation), et *a priori* inconnu. Un des buts de la méthode est donc de déduire ce comportement du MHE traduit par exemple par le module sécant effectif $\underline{\mathbf{L}}$:

$$\underline{\Sigma} = \underline{\mathbf{L}} : \underline{\mathbf{E}} \quad (4.22)$$

d) La démarche

Les modèles de transition d'échelles lient le comportement macroscopique du VER (et donc du MHE) au comportement microscopique des phases. La démarche comporte trois étapes pour un incrément de chargement.

La figure IV.4 représente schématiquement l'ensemble de cette démarche. On peut comprendre simplement le double intérêt suscité par ces méthodes : elles permettent à la fois d'obtenir des informations très locales sur l'état mécanique à l'intérieur de chaque VER, en permettant une représentation réaliste du comportement local, et aussi de l'évolution des champs macroscopiques qui prend en compte la microstructure.

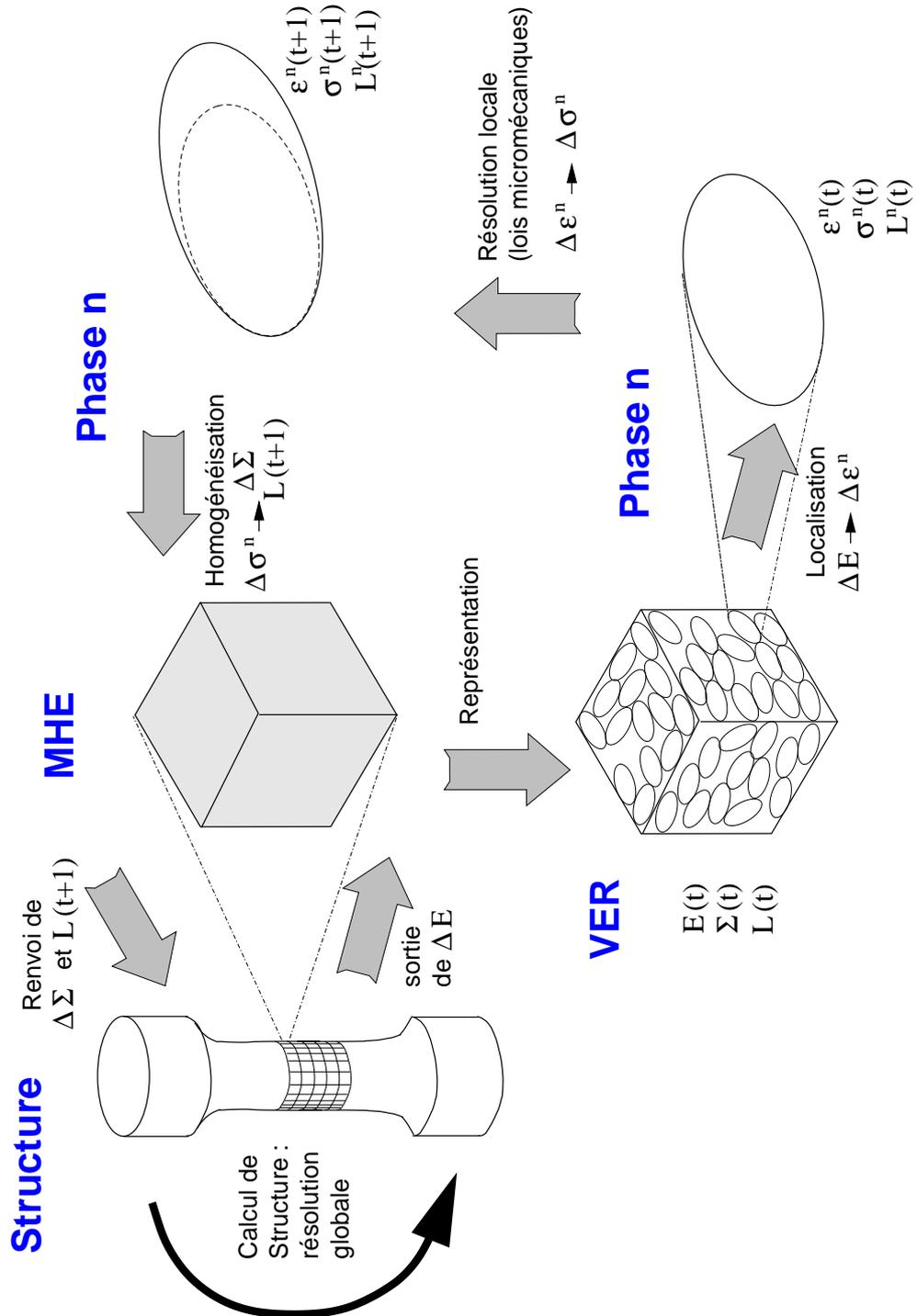


FIG. IV.4 – La démarche de transition d'échelles, schématisée dans le cas d'un couplage itératif entre calcul de structure et méthodes d'homogénéisation.

- La localisation : Cette étape est aussi la plus “importante”, au sens où c’est souvent celle qui pose le plus de problème. Elle consiste à relier l’évolution de l’état individuel de chacune des phases à l’évolution macroscopique de l’état mécanique imposé par le chargement.
- La description locale du comportement : elle passe simplement par l’utilisation d’une loi micromécanique ou phénoménologique telle que présentée précédemment pour décrire le comportement des phases.
- L’homogénéisation : elle consiste à moyenner les champs des phases sur l’ensemble du VER selon les équations 4.21.

IV.2.3 Modèles de transition d’échelles analytiques

a) L’hypothèse des champs moyens sur les phases

Les modèles de transition d’échelles abordés dans cette partie ont en commun l’hypothèse forte des champs moyens, en déformation et en contrainte dans chaque phase. En effet, on attribue une loi de comportement moyenne à chaque phase n :

$$\sigma_{ij}^n = l_{ijkl}^n \varepsilon_{kl}^n \quad (4.23)$$

où l_{ijkl}^n est le tenseur d’ordre quatre décrivant le comportement de la phase n .

On qualifiera donc les modèles de transition d’échelles abordés dans ces travaux de Modèles à Champs Moyens (MCM), par opposition à d’autres approches, qui ne seront pas détaillées ici mais seulement évoquées.

b) Premières approches basées sur la notion d’inclusion

Il est nécessaire de considérer un lien supposé entre le comportement du VER et celui d’une phase. Les premiers modèles simples ont été proposés dans le cas du problème de la déformation élastoplastique des polycristaux. Ils s’appuient généralement sur des lois de comportement des monocristaux micromécaniques à systèmes de glissement.

Dans une première approche, Taylor [Taylor, 1938] commence par postuler l’homogénéité des déformations sur l’ensemble du VER, puis les assimile à la déformation plastique :

$$\underline{\mathbf{E}} = \underline{\varepsilon}^n = \underline{\varepsilon}_p^n \quad (4.24)$$

Ce faisant, et si l’on reprend les liens évoqués au paragraphe A-II.2 entre les contraintes internes et les déformations élastiques, on peut donc considérer qu’il les néglige toutes deux.

Lin reprend une idée d’uniformité des déformations, mais sans négliger les déformations élastiques [Lin, 1957], ce qui conduit, pour un matériau élastoplastique isotrope, à une règle de localisation des contraintes simple :

$$\underline{\sigma}^n = \underline{\Sigma} + 2\mu(\underline{\mathbf{E}}_p - \underline{\varepsilon}_p^n) \quad (4.25)$$

où μ représente le module de cisaillement élastique. Cette approche mène finalement l'auteur à une approximation élastique des interactions entre phases, et surestime donc le module du MHE, qui apparaît comme trop "raide". On pourra d'ailleurs faire l'analogie avec l'hypothèse de Voigt en élasticité, qui conduit à la borne supérieure d'estimation des propriétés élastiques des composites.

L'approche opposée qui consiste à postuler une uniformité des champs de contraintes, d'abord proposée par Sachs [Sachs, 1928], et reprise plus tard dans [Batdorf et Budiansky, 1949] conduit simplement à :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} \quad (4.26)$$

Cette approche, conduit à un module du MHE trop faible et donc à une réponse trop "souple", l'analogie avec l'hypothèse de Reuss en élasticité étant là aussi possible.

c) Le problème de l'inclusion d'Eshelby

Une fois les notions de phases et de VER établies, la majorité des modèles se base sur l'idée qu'une phase peut être représentée individuellement comme une inclusion ellipsoïdale de géométrie donnée, plongée dans une matrice, soit un milieu homogène virtuel, représentant le milieu environnant, et soumis à des conditions homogènes à l'infini (le MHE). La géométrie en ellipsoïde présente deux avantages : pour des comportements linéaires et en considérant la cohésion entre inclusion et matrice parfaite, on connaît la solution du problème en contrainte et déformation dans l'inclusion, qui a été donnée par Eshelby [Eshelby, 1957] et est homogène dans l'inclusion.

Eshelby a défini dans ce cadre un tenseur, le tenseur d'interaction d'Eshelby $\underline{\underline{S}}$ produit du module élastique $\underline{\underline{C}}$ et d'une intégrale de l'opérateur de Green modifié $\underline{\underline{\Gamma}}$. Son obtention n'est pas décrite ici, mais l'on se reportera à [Bornert et al., 2001b] pour le développement dans le cas de différentes morphologies de phases.

On considère maintenant la déformation $\underline{\underline{\xi}}^l$, ou déformation "libre de contrainte" de l'inclusion, soit la déformation qui aurait lieu si l'inclusion n'était pas plongée dans la matrice. La déformation associée de l'inclusion i (soit de la phase i) une fois plongée dans la matrice (le MHE) s'écrira par l'intermédiaire du tenseur d'Eshelby :

$$\underline{\underline{\xi}}^i = \underline{\underline{S}} : \underline{\underline{\xi}}^l \quad (4.27)$$

Il résulte de cette interaction entre matrice et inclusion une déformation $\underline{\underline{\xi}}^i$ de valeur absolue inférieure à $\underline{\underline{\xi}}^l$, la déformation libre, et aussi une contrainte, que l'on pourra qualifier de contrainte d'accommodation, dont la valeur dans l'inclusion (phase i) vaut :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{C}} : (\underline{\underline{\xi}}^i - \underline{\underline{\xi}}^l) \quad (4.28)$$

De plus, en jouant sur sa géométrie, on pourra très simplement représenter diverses morphologies de microstructures (matrice-inclusion sphérique, matrice-fibre, polycristaux

à grains équiaxes ou allongés...), de manière certes approchée, mais aussi commode mathématiquement et efficace du point de vue de la représentativité.

Dès lors deux problèmes se posent :

- Le comportement ou les propriétés du MHE doivent être estimés si l'on veut appliquer une solution quelconque au problème.
- Les comportements des phases et du MHE sont très rarement linéaires, mais en général élastoplastiques, soit dépendants de l'histoire de déformation (écrouissage). Il sera donc nécessaire de linéariser le problème pour le rapporter à un problème dont la solution est donnée par le problème de l'inclusion.

d) L'approche de Kröner

Le problème est donc que la solution d'Eshelby si elle est bien connue, n'est applicable que dans le cas de comportements élastiques. Dans ce cadre, Kröner décide de traiter la déformation plastique de chaque phase n comme une déformation libre au sens d'Eshelby, en attribuant au MHE un comportement équivalent élastique, et en considérant que la différence entre déformation plastique homogène équivalente du VER $\underline{\underline{\mathbf{E}}}_p$ et de la phase (de l'inclusion) $\underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_p^n$ pilote les variations de contrainte. La règle de localisation obtenue s'écrit alors, avec les mêmes hypothèses que pour l'équation 4.25 :

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}}^n = \underline{\underline{\boldsymbol{\Sigma}}} + \underline{\underline{\mathbf{C}}}: (\underline{\underline{\mathbf{I}}} - \underline{\underline{\mathbf{S}}}) : (\underline{\underline{\mathbf{E}}}_p - \underline{\underline{\boldsymbol{\varepsilon}}}_p^n) \quad (4.29)$$

où $\underline{\underline{\mathbf{I}}}$ représente le tenseur identité d'ordre 4.

En supposant le MHE comme élastique, Kröner commet certes une approximation, mais ouvre aussi la voie à de nombreuses autres approches, de nature similaire, mais où le comportement du MHE sera corrigé pour tenir compte de la non-linéarité.

Dans le cas d'une phase sphérique, on se ramènera à un module équivalent de forme :

$$\underline{\underline{\mathbf{L}}} \approx \frac{12\mu\kappa}{3\kappa + 4\mu} \underline{\underline{\mathbf{K}}} + \frac{2\mu(9\kappa + 8\mu)}{5(3\kappa + 4\mu)} \underline{\underline{\mathbf{J}}} \quad (4.30)$$

où $\underline{\underline{\mathbf{K}}}$ et $\underline{\underline{\mathbf{J}}}$ représentent respectivement les opérateurs d'ordre 4 sphériques et déviatoriques.

e) Approximations du module effectif

Les approches proposées viseront donc à remplacer, dans l'équation 4.29, l'utilisation du tenseur d'élasticité $\underline{\underline{\mathbf{C}}}$ par celle d'un module approché. Plusieurs classes de modèles existent alors se limitant aux matériaux à un seul potentiel plastique et sont détaillées dans [Bornert et al., 2001d], telles que les approximations incrémentales [Hill, 1965], sécantes [Berveiller et Zaoui, 1979] ou encore tangentes [Molinari et al., 2004]. On pourra aussi se tourner vers les approches affines [Masson et al., 2000], ou vers les approches variationnelles [Ponte-Castaneda, 1991].

Notons que le problème de l'homogénéisation des matériaux élasto-viscoplastiques ne peut être rigoureusement traité par ces approches, puisqu'il implique différents ordres de dérivation par rapport au temps pour les champs de contrainte et déformation. Le récent développement du modèle en champ translaté [Berbenni, 2002, Sabar et al., 2002] donne une solution satisfaisante à ce problème en utilisant un modèle d'approche incrémentale à variables internes. Ce modèle repose sur l'utilisation de l'opérateur standard pour traiter la partie élastique de la déformation, et d'un opérateur adapté au traitement de la partie viscoplastique, représentée par un champ translaté cinématiquement admissible. Les résultats de ce modèle pour les comportements héréditaires ont été comparés avec succès à d'autres approches de mise en oeuvre plus complexe.

Il existe donc de nombreuses classes de modèles, toujours en cours de développement et d'extension. Toutefois, la mise en oeuvre numérique parfois délicate de ces approches poussera pour ces travaux à évoquer et utiliser des modèles certes plus "simples", mais qui ont pu faire la preuve de leur efficacité dans différentes applications en mécanique des matériaux hétérogènes.

Cas des composites : Le modèle de Mori-Tanaka Dans le cas de composites élastiques faiblement chargés (fraction volumique d'inclusions f^i), Mori et Tanaka [Mori et Tanaka, 1973] proposent de considérer que le module équivalent du MHE est aussi celui de la matrice m . La règle de localisation obtenue est alors la suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}^m = \underline{\underline{\mathbf{C}}} : (\underline{\underline{\mathbf{I}}} - \underline{\underline{\mathbf{S}}}) f^i \underline{\underline{\xi}}_p^i \quad (4.31)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\mathbf{C}}} : (\underline{\underline{\mathbf{S}}} - \underline{\underline{\mathbf{I}}}) (1 - f^i) \underline{\underline{\xi}}_p^i \quad (4.32)$$

Une extension au cas de la matrice élastoplastique est possible, c'est la démarche utilisée dans [Pesci, 2004] pour représenter le biphasé ferrite-cémentite. Notons toutefois que ce modèle devra être limité aux cas de faibles fractions volumiques d'inclusions.

Le modèle de Berveiller et Zaoui (BZ). En s'appuyant sur la résolution du problème auto-cohérent proposé par Hill, Berveiller et Zaoui [Berveiller et Zaoui, 1979] ont proposé une approche intégrée valable dans le cas des matériaux polycristallins isotropes, pour des chargements monotones et radiaux. En considérant une inclusion élastoplastique sphérique plongée dans un milieu élastoplastique de module approché sécant, la règle de localisation s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}}^n = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)\alpha(\underline{\underline{\mathbf{E}}}_p - \underline{\underline{\xi}}_p^n), \text{ avec } \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)}, \text{ et } \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2}\mu \frac{E^{Mises}}{\Sigma^{Mises}} \quad (4.33)$$

où E^{Mises} et Σ^{Mises} représentent les valeurs équivalentes des grandeurs tensorielles au sens de von Mises :

$$\text{ou } \begin{cases} \boldsymbol{\varepsilon}^{Mises} = \sqrt{\frac{2}{3}} \boldsymbol{\xi} : \boldsymbol{\xi} & \text{pour une déformation} \\ \boldsymbol{\sigma}^{Mises} = \sqrt{\frac{3}{2}} \boldsymbol{s} : \boldsymbol{s} & \text{pour une contrainte} \end{cases} \quad (4.34)$$

avec \boldsymbol{s} la composante déviatorique du tenseur des contraintes : $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{I}$.

C'est bien l'évolution du module approché considéré qui donne au comportement prévu par cette approche un avantage sur le modèle de Kröner. Cette approche sera la première à bien prendre en compte l'écroissage macroscopique des polycristaux au travers du ratio $\frac{E^{Mises}}{\Sigma^{Mises}}$.

Le modèle en β , une approche phénoménologique Le modèle en β [Cailletaud et Pilvin, 1994], repose sur une idée empruntée à la description de l'écroissage interphase par Chaboche [Lemaitre J., 1993], qui utilise une approche cinématique, similaire à celle décrite pour le monocristal au paragraphe IV.1.5. Cailletaud et Pilvin choisissent, plutôt qu'une évaluation de l'évolution des modules du MHE, une description phénoménologique de ceux-ci au travers de la variable tensorielle β^n propre à chaque phase et pouvant évoluer en cours de chargement. La règle de localisation s'écrit alors sous une forme différente de celle des règles plus courantes :

$$\boldsymbol{\sigma}^n = \boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{L}^n : (\mathbf{B} - \beta^n) \quad (4.35)$$

\mathbf{L}^n représente un module estimé. On pourra choisir par exemple d'utiliser l'estimation de Kröner avec prise en compte de la morphologie sphérique. L'évolution de β^n est décrite par l'équation suivante :

$$\dot{\beta}^n = \dot{\xi}_p^n - D^n (\dot{\xi}_p^{n,Mises} (\beta^n - \delta^n \xi_p^n)) \quad (4.36)$$

Les coefficients δ^n et D^n sont propres à la phase, et devront être ajustés, par exemple, par des calculs par EF explicites du composite. Afin de vérifier l'équilibre général qui découle de l'hypothèse des champs moyens, on écrit :

$$\mathbf{B} = \langle \beta^n \rangle \quad (4.37)$$

Ce modèle possède l'avantage d'être facilement utilisable dans de nombreuses applications, comme par exemple dans le cas de calculs éléments finis utilisant des polycristaux aux points d'intégrations [Cailletaud et Pilvin, 1994]. Il est en outre adapté aux modélisations des comportements cycliques de par une bonne possibilité de description de l'écroissage interphase. Bugat [Bugat, 2000] l'a utilisé pour l'homogénéisation d'un bi-cristal austéno-ferritique, en calant les paramètres du modèle sur une représentation par éléments finis de la morphologie des phases, et en faisant appel à un module \mathbf{L}^n pour chaque phase inspiré par les travaux de Kröner, mais prenant la précaution d'utiliser des tenseurs d'Eshelby adaptés aux morphologies décrites.

Dans le cas où l'on considère une morphologie de phases sphériques, et que l'élasticité est isotrope on se ramène alors à :

$$\underline{\underline{\sigma}}^n = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{\underline{\mathbf{B}}} - \underline{\underline{\beta}}^n), \text{ avec } \beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)} \quad (4.38)$$

f) Développements récents

Afin de se libérer de l'hypothèse des champs moyens, deux méthodes majeures ont aussi été proposées récemment. Les approches à NTFA (acronyme anglicisé pour analyse de champs de transformation non-uniforme) [Michel et Suquet, 2004] ont pu bénéficier de la puissance des traitements par l'analyse numérique. Elles sont inspirées des méthodes TFA [Dvorak et al., 1994], et permettent une homogénéisation/relocalisation des contraintes d'un composite sur une structure complète à travers l'étude préalable par éléments finis des différents "modes" de déformation d'un VER et leur traitement par transformée de Fourier rapide. La relocalisation vers le VER permet alors d'obtenir une estimation de la répartition des champs non-uniformes à l'intérieur même des phases. Enfin pour les polycristaux, les développements concernent les approches du second ordre [Ponte-Castaneda, 2002] qui utilisent non plus la contrainte et la déformation comme variables d'état, mais bien leurs représentations statistiques au second ordre, ce qui permet de tenir compte d'hétérogénéités intragranulaires.

IV.2.4 Le calcul de microstructures par éléments finis.

a) Positionnement par rapport aux approches analytiques

L'intérêt de ces calculs de microstructures tient généralement à la prise en compte naturelle des phénomènes à l'origine des hétérogénéités mécaniques, et à une représentation facilitée des hétérogénéités mécaniques intra-phases.

Les modèles de transition d'échelles analytiques permettent dans une certaine mesure de tenir compte de la morphologie des phases au travers des tenseurs d'influence d'Eshelby. L'apport des calculs de microstructure sera ici de permettre de représenter explicitement non seulement les morphologies de phase, mais aussi les effets locaux de voisinage entre phases. Dans notre cas, l'étude de la rupture par clivage, ce type de calcul donne accès aux champs de contrainte et de déformation intragranulaires, et permet donc de distinguer le comportement à proximité des joints de grains de celui des zones moins perturbées par l'accommodation plastique.

Si ces techniques prennent parfois tout leur sens, comme ces travaux tenteront de le démontrer, par exemple dans l'étude de phénomènes très locaux comme le déclenchement du clivage, il n'en reste pas moins qu'elles restent numériquement plus coûteuses et difficiles à mettre en oeuvre que les méthodes classiques d'homogénéisation. De plus, les volumes représentés sont, par extension, de taille moindre. Leur emploi devra donc se justifier pleinement eu égard à leur coût numérique et aux difficultés de mises en oeuvre.

Afin de tenir compte de la microstructure réelle, les calculs devront être faits sur des maillages des microstructures qui pourront être obtenus de deux manières. La première consiste à utiliser une microstructure réelle, comme décrit au tout début de cette partie. Toutefois, les outils nécessaires n'étant pas toujours disponibles, ou leur utilisation n'étant pas toujours pertinente ou possible, plusieurs autres méthodes ont été développées, comme notamment la génération de microstructures synthétiques.

b) Exemples d'utilisations de microstructures réelles

Les composites : l'apport des développements récents de l'imagerie L'application de ces techniques aux composites, aux contrastes de propriétés physiques par phase relativement significatifs pour une observation par les techniques 3D, est devenu, sinon courante, au moins accessible.

Leur utilisation directe a déjà donné lieu à quelques applications. A titre d'exemple, récent et peu courant, l'application proposée dans [Kanit et al., 2006] fait le lien entre la microstructure biphasée d'une crème glacée et ses caractéristiques mécaniques et thermiques, en insistant particulièrement sur l'importance de la discrétisation et des tailles des volumes représentés. Deux microstructures biphasées de fractions volumiques identiques mais de morphologies différentes sont reproduites puis étudiées. La technique d'imagerie utilisée est la microscopie confocale 3D. Cette technique est réservée aux échantillons translucides et n'aura donc pas d'utilisation potentielle pour les matériaux métalliques. Comme vu en introduction, on se tournera plutôt dans le cas des métaux vers la microtomographie X.

Enfin, et c'est là aussi un avantage des composites, l'observation de surface classique, pour peu qu'on prenne la peine de vérifier qu'elle est valable dans différentes orientations, et que le nombre de phases en présence soit raisonnable, est souvent suffisante pour caractériser la morphologie du composite, et le représenter de manière exhaustive.

Les polycristaux Un travail portant sur la prise en compte de la morphologie de la microstructure des aciers de cuves a été réalisé dans [Sekfali, 2004]. Les microstructures étudiées sont bainitiques revenues (semblables à celles étudiées dans ce travail) ou martensitiques. La technique employée consiste à utiliser directement la cartographie EBSD d'un échantillon pour reconstruire un maillage 2D associé, et comparer la pertinence des simulations par rapport à des mesures de champs par corrélation d'images (figure IV.5). Ces travaux proposent une approche approfondie de la plasticité des aciers faiblement alliés, à travers une formulation en grandes déformations et une loi de plasticité cristalline à densité de dislocations identifiée à différentes températures et vitesses de déformation. Ils sont complétés par les travaux de thèse de Libert [Libert, 2006].

D'autres travaux tentent aussi de reproduire, en introduisant les grandes déformations et la rotation de réseau, le fractionnement des grains (apparition de joints de faibles désorientations) en cours de déformation plastique. Entre autres considérations sur des

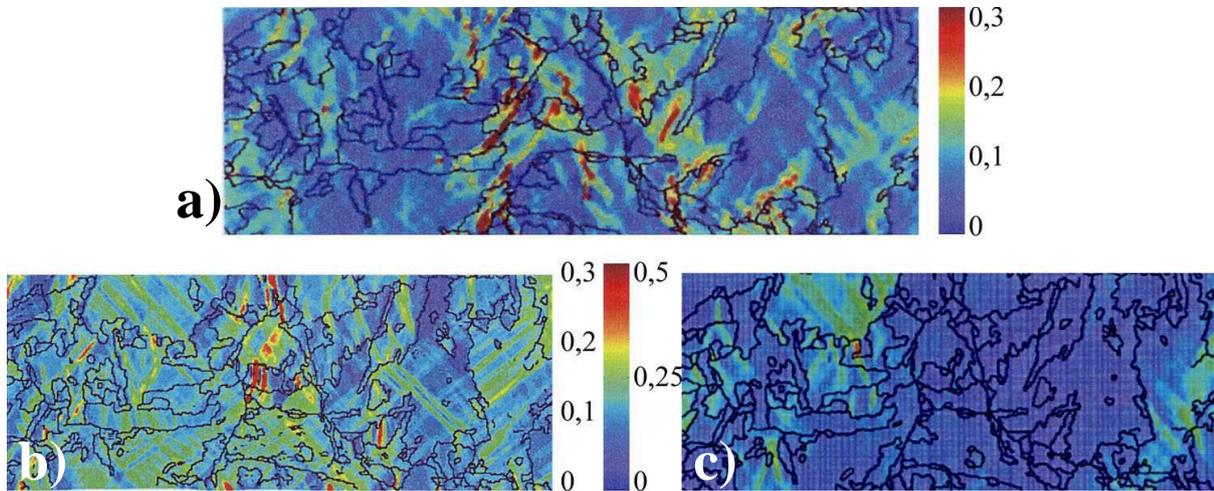


FIG. IV.5 – Comparaison entre les cartographies de déformation dans la direction principale en cours de traction d'un acier 16MND5 proche de BQ12 : a) Expérimentale obtenue par mesure de champs pour 10% de déformation [Sekfali, 2004, Rey et al., 2006] ; b) simulée obtenue sur une seule couche 2D pour 9% de déformation, c) simulée obtenue avec un RVE sous jacent pour 7,5% de déformation.

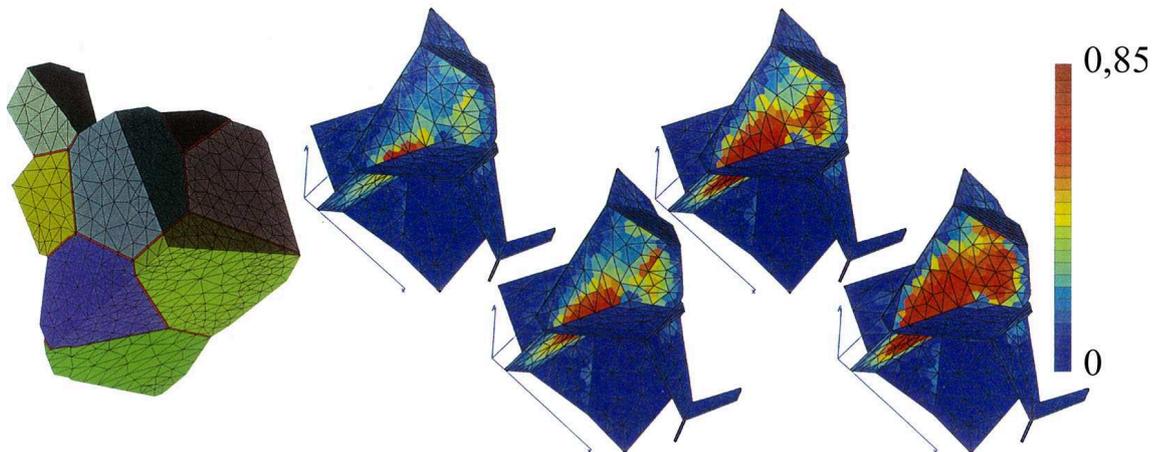


FIG. IV.6 – Un exemple d'étude développé grâce aux outils de synthèse de maillages. Les joints de grains d'un morceau du VER étudié sont maillés en rouge sur la première figure. Les figures suivantes représentent uniquement les joints et permettent de visualiser le développement de l'endommagement durant les 60 premières secondes d'une traction (la déformation macroscopique est de 1.2% sur la dernière image). [Diard, 2001]

calculs 3D, ils comparent avec succès l'évolution de la désorientation entre sous-volumes dans quelques grains lors de mesures EBSD in-situ avec les résultats des calculs éléments finis 2D [Erieau et Rey, 2004, Buchheit et al., 2005].

Comme nous l'évoquerons plus loin, ces approches nécessitent une certaine prudence, de par l'importance de l'effet de la troisième dimension (i.e. de la microstructure sous-jacente).

c) Méthodes de générations des microstructures synthétiques et applications

Pour ce qui est des aspects géométriques, les moyens théoriques de caractérisation des microstructures existent. On pourra se reporter à [Decker et Jeulin, 2000, Bornert et al., 2001c] pour des éléments de caractérisation et de reproduction des microstructures.

Utilisation de géométries simplifiées : Pour les matériaux polycristallins, de nombreuses approches ont été proposées pour tenir compte de la microstructure et donc de la morphologie en grains. Les premières approches prennent en compte une discrétisation des grains sous forme de motifs géométriques réguliers [Takahashi, 1988, Beaudoin et al., 1993]. Ainsi les grains sont représentés sous forme d'éléments ou d'assemblages d'éléments de formes carrées ou hexagonales, extrudées dans le cas 3D. La nécessité de fortes puissances de calcul limite dans ces travaux la taille du volume représenté. D'une manière générale, on peut considérer [Barbe, 2000] que l'utilisation du calcul de microstructures grossières est adapté pour l'approximation des lois de comportement globales des polycristaux (homogénéisation par éléments finis), mais il a été démontré leur faible pouvoir prédictif lorsque l'on considère les hétérogénéités intragranulaires. Cette faiblesse est attribuée tout d'abord à un manque de discrétisation, et au second ordre, au nombre insuffisant d'interfaces d'un grain avec ses voisins pour ces représentations simplifiées [Mika et Dawson, 1998].

Utilisation de la technique des polyèdres de Voronoï : Cette technique de génération de microstructure est exposée à l'annexe A-III.1.

L'ajout de fonctions supplémentaires [Decker et Jeulin, 2000] telle que la répulsion entre germes permet de contrôler le processus de formation de microstructures et évite certains écueils (apparitions de germes très proches donnant de très petits domaines difficiles à mailler, voire problématiques durant le calcul par manque de discrétisation). La représentation des microstructures est aussi facilitée par la possibilité d'attribuer au sein d'un même élément différents comportements (voire différentes orientations) à chaque point d'intégration.

Les premiers travaux utilisant ces méthodes en 3D sur des volumes significatifs avec prise en compte de la plasticité cristalline sont relativement récents [Quicili et Cailletaud, 1999]. Les travaux de thèse de Barbe [Barbe, 2000] sont, pour leur part, la première tentative aboutie de systématiser et d'explorer les possibilités et limites de ces méthodes.

La plupart des calculs d'agrégats polycristallins présentés dans ces travaux suivront les recommandations de cet auteur.

Les travaux de Diard [Diard, 2001, Diard et al., 2005] ont aussi largement utilisé les calculs d'agrégats. La première utilisation concerne le comportement du matériau des gaines de combustible nucléaire. Un modèle de plasticité cristalline est calé en utilisant des simulations sur calcul d'agrégats polycristallins. Une méthode originale est ensuite proposée pour utiliser des calculs d'agrégats où les joints de grains sont explicitement maillés, afin d'étudier l'endommagement intergranulaire, en tenant compte du couplage avec les effets de l'évolution de l'environnement (corrosion sous contrainte). Les maillages présentés pour les études sur microstructures sont, par commodité, des maillages 2D, mais l'auteur n'oublie pas d'évoquer les limitations pouvant apparaître, en prenant soin d'appliquer sa méthode à des maillages 3D raisonnables à titre de comparaison (figure IV.6).

Les aspects à prendre en compte lors des calculs d'agrégats polycristallins sont donc relativement connus et l'on peut les résumer ainsi :

- L'influence du type d'éléments utilisés pour la représentation est relativement minimale. Les maillages réguliers sur mailles cubiques donnent, à condition d'une discrétisation suffisante, les mêmes résultats que des maillages libres avec éléments tétraédriques dont les mailles décrivent la géométrie de la microstructure. Seuls les joints de grains sont le lieu de petites variations entre les deux représentations.
- Des variations abruptes et non négligeables de contrainte peuvent apparaître au sein d'un même élément (cet aspect sera développé plus loin), bien que le résultat en moyenne sur l'élément soit correct.
- L'influence du maillage sur la raideur d'ensemble de l'agrégat n'est significative qu'en cas de discrétisation insuffisante, l'utilisation d'éléments quadratiques étant de toute façon préférable.
- En partant sur la base d'éléments cubiques quadratiques à 27 points d'intégration, Barbe [Barbe, 2000] estime que les nombres de point d'intégrations moyens à utiliser pour la représentation du grain devront être d'environ 200, 750, et 3000 points d'intégration pour reproduire correctement, respectivement, le comportement homogénéisé de l'agrégat, le comportement moyen de chaque grain, et l'évolution intragranulaire des champs mécaniques. Pour sa part, Diard estime que 500 points d'intégrations sont suffisants pour décrire le comportement moyen des grains. Ces estimations sont basées sur des études de convergence à la taille de maillage, et sur un écart de 1% par rapport aux grandeurs de référence pour une forte discrétisation.
- Dans le cas d'un comportement macroscopique isotrope, environ 200 grains sont suffisants pour s'assurer d'une isotropie correcte du comportement global. Ce chiffre représente en fait une limite inférieure à ne pas franchir si l'on veut parler de VER.
- Lorsque l'on atteint pas vraiment la taille suffisante pour le VER, le comportement de celui-ci et les champs locaux peuvent dépendre fortement des conditions aux limites (CAL), ce qui n'est d'ailleurs pas une exclusivité des calculs de microstructure. On

trouvera à l'annexe A-III.2 les éléments expliquant les différents types de conditions aux limites et leurs effets.

Il faudra bien évidemment extraire des microstructures l'information pertinente pour la synthèse d'une microstructure représentative. Dans le cas qui nous intéresse, celui du maillage de microstructures d'agrégats polycristallins, les informations pertinentes ne sont guère éloignées des informations disponibles pour la représentation dans les modèles de transition d'échelles. Les paramètres microstructuraux retenus seront bien souvent, la taille des grains¹, leurs rapports de forme, et leurs orientations cristallographiques. Là encore, on peut sous certaines conditions se contenter d'une représentation statistique des informations (textures d'orientation, distributions de tailles de grains...). Une fois ces informations jugées comme pertinentes et suffisantes, rien n'empêche de générer des microstructures pour tester virtuellement les propriétés et faciliter la mise au point des matériaux.

Des difficultés persistantes pour la représentation de l'acier 16MND5 : Le cas des orientations cristallines dans la bainite est un cas particulier méritant d'être discuté. En effet, nous avons vu dans le premier chapitre que les orientations des paquets de lattes au sein d'un ancien grain austénitique ne sont pas quelconques, mais respectent les relations d'orientations K-S et N-W. Cet aspect peut influencer les propriétés du matériau, en termes de comportement, mais surtout en termes de transmission du clivage, si les joints de grains sont considérés comme des barrières suffisantes.

Ces aspects ne sont toutefois pas pris en compte dans les présents travaux, où l'on se contentera de reproduire la texture cristallographique isotrope du matériau. Deux raisons nous poussent à ne pas améliorer la représentation plus avant. Tout d'abord les observations qualitatives du paragraphe III.2 n'ont pas démontré une importance primordiale des désorientations entre paquets voisins sur l'apparition des hétérogénéités mécaniques par les mécanismes de plasticité. D'autre part, les réflexions du chapitre V montreront que dans le cas qui nous intéresse ici, les désorientations entre paquets voisins ne sont pas considérés comme des obstacles microstructuraux à la transmission du clivage.

On pourra néanmoins se reporter aux travaux en cours d'Osipov *et al.* [Osipov et Cailletaud, 2006], dont le but est de donner une représentation la plus réaliste possible de la microstructure du matériau bainitique. Les auteurs commencent par générer une structure en grains relativement équiaxes représentant l'austénite formée lors de l'élaboration du matériau, puis redécoupent chacun des grains obtenus en tranches, parallèlement à un plan quelconque, et correspondant aux différents variants. L'orientation cristalline de chacune de ces tranches est alors choisie comme dépendante de celle du grain de départ par le choix d'un des 24 variants tirés des relations d'orientation K-S. On imite de cette manière le processus de formation naturel de la structure bainitique, et l'on obtient une bonne représentation de la bainite comme montré sur la figure IV.7. Cette méthode donne des résultats encourageants.

¹Ou plutôt leur taille relative, si les modèles n'incluent aucun effet de taille.

d) Quelques éléments concernant la prise en compte de la troisième dimension

Dans le cadre des travaux sur l'acier 16MND5 de Sekfali [Sekfali, 2004], il est montré que dans le cas de simulations avec représentation d'une seule couche de matériau, le comportement global n'est pas assez raide, et que le comportement à l'intérieur des coupes du grain est perturbé, la localisation se faisant trop tôt sur les grains bien orientés pour la déformation plastique. Pour palier ce problème, une technique est proposée afin d'essayer de prendre en compte le rôle de la microstructure autour de la couche considérée. L'idée proposée passe par l'intermédiaire d'un MHE de comportement moyen équivalent au comportement macroscopique de l'agrégat (figure IV.8). Il est démontré que cette solution s'avère peu efficace, puisqu'à l'inverse de la simulation sur une seule couche, elle diminue fortement la possibilité pour la déformation de localiser. Lorsque seule la mesure de surface est disponible pour la bainite, les auteurs préconisent donc de l'utiliser telle quelle sans MHE additionnel tout en sachant que les effets de la troisième dimension ne sont pas bien représentés, malgré leur importance (figure IV.5).

Les auteurs remarquent par ailleurs que la martensite (structure relativement proche de la bainite mais possédant une structure en paquets bien plus fins, et donc une "taille de grains" plus petite) est plus facile à modéliser en tenant compte du MHE. Ces conclusions n'ont toutefois pas valeur de généralité. La limitation des tailles représentées, les problèmes de conditions aux limites posés en traction 2D, l'effet de la couche de MHE (qui est à même de créer des incompatibilités au même titre que les joints de grains) posent de nombreuses questions, et montrent qu'une identification de lois de comportement passant par les outils de mesure de champs pose de nouveaux problèmes.

Doit-on alors se contenter de l'information de surface ? Cela se justifie pleinement dans certains cas, comme l'étude de couches polycristallines de faibles épaisseurs largement inférieures aux autres dimensions des grains (microstructure réelle "2D"). Ainsi l'étude de Parisot *et al.* [Parisot et al., 2000] se contente d'une observation de surface pour mailler la couche de zinc d'un acier galvanisé et en étudier les caractéristiques. La modélisation faite dans les travaux de thèse de M'Cirdi [M'Cirdi, 2000] est à ce titre aussi valide puisque la modélisation porte sur des éprouvettes d'austéno-ferritiques ne comportant qu'un grain dans l'épaisseur.

Dès lors que l'hypothèse expérimentale 2D n'est plus valable, les résultats quoiqu'acceptables se heurtent à l'absence de prise en compte de la microstructure sous-jacente. De nombreux travaux récents utilisent ainsi une démarche similaire (utilisation de la cartographie EBSD et extrusion dans la troisième direction ou utilisation 2D), et mettent en évidence le même problème [Roters, 2005, Eriau et Rey, 2004, Fu et al., 2004, Hoc et al., 2003].

Récemment encore, aucun résultat ne permettait de quantifier réellement l'erreur possible effectuée en ne prenant pas en compte la microstructure sous-jacente. Les travaux de thèse d'Asmahana Zeghadi [Zeghadi, 2005] fournissent une étude pertinente à ce sujet.

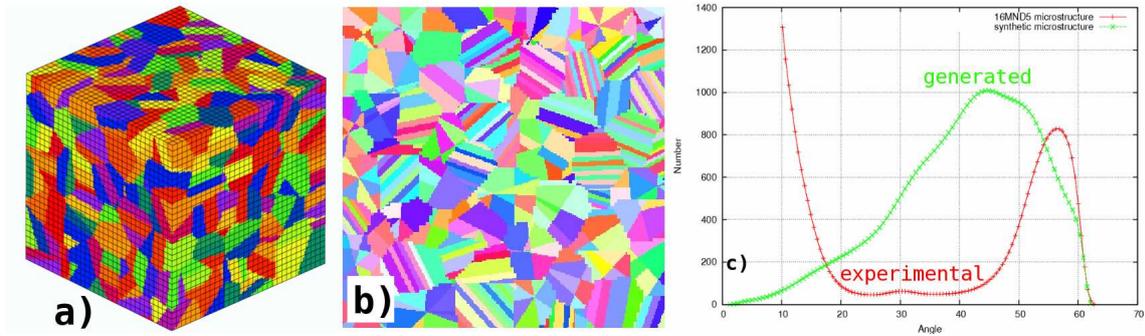


FIG. IV.7 – Un exemple de microstructure générée permettant de décrire de manière réaliste la croissance de la structure bainitique. a) Vue 3D d'une microstructure générée par le processus. b) Vue en coupe de la microstructure d'un autre agrégat généré par subdivision d'ancien grains. Le panel de couleurs utilisées est inspiré de la représentation IPF en EBSD. c) Distribution des désorientations comparées entre le matériau et la microstructure générée selon le processus décrit. [Osipov et Cailletaud, 2006]

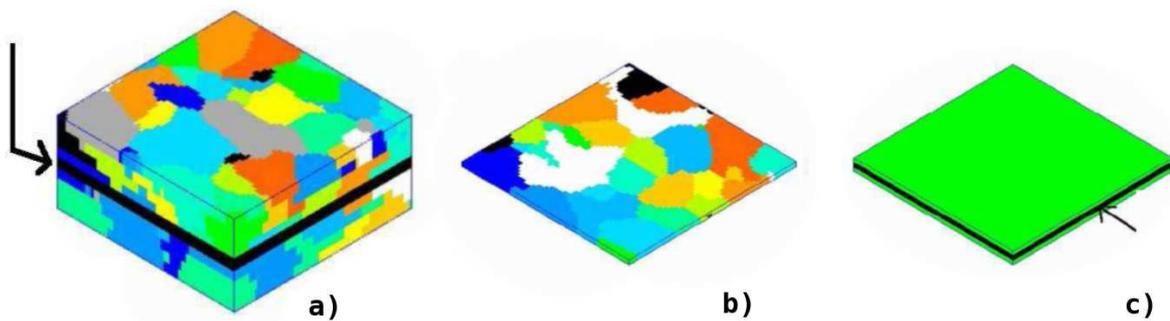


FIG. IV.8 – Maillages réalistes utilisés pour l'étude de l'influence de la prise en compte de la morphologie située au dessus et en dessous d'une coupe EBSD du matériau : a) Maillage complet obtenu par cartographies EBSD et polissages successifs. b) Tranche étudiée. c) Maillage constitué de la même tranche entourée d'un MHE. [Rey et al., 2006]

Afin de quantifier l'erreur possible, plusieurs microstructures 3D ont été générées. Celles-ci sont différentes bien qu'une des surfaces des agrégats soit identique (figure IV.9). Ces différentes microstructures ont ensuite été chargées en traction. On observe ainsi sur ces deux surfaces l'évolution des champs mécaniques pour une microstructure apparente identique.

On observe sur la figure IV.9 deux champs de déformation plastique bien distincts, avec certaines parties de grains entrées fortement en plasticité, ou non, selon la microstructure sous-jacente. Ces calculs ont été réalisés pour 7 microstructures différentes. Le traitement statistique des résultats obtenus montre des variations considérables pouvant aller localement jusqu'à 300% d'erreur sur l'estimation des champs de déformation pour 2% de déformation macroscopique, que ce soit au niveau des joints ou du coeur des grains. Ce résultat remet donc pour le moins en cause l'utilisation brute des techniques de mesures de champs pour l'identification à l'échelle microscopique des paramètres matériaux, exception faite des cas simplifiés, déjà évoqués.

En ce sens, plusieurs travaux pointent d'autres difficultés, [Doumalin, 2000], ou sont en cours pour tenter de déterminer ce que l'on peut en espérer. L'effet de l'apparition du relief [Amiot et al., 2005], l'effet de la structure qui se situe sous le plan d'observation [Gelebart, 2005, Dexet et al., 2005] restent actuellement des problèmes ouverts, bien que les travaux de Zeghadi permettent de quantifier l'erreur possible.

IV.3 Choix des modèles et hypothèses

IV.3.1 La stratégie de modélisation : une approche multi-échelle

Deux contraintes s'appliquent au choix de la représentation à utiliser dans cette étude. La première concerne l'échelle inférieure à représenter, et sera liée aux types de phénomènes à prendre en compte dans l'approche de mécanique de la rupture par clivage.

Le principal manque des approches actuelles (approches locales de la rupture) est leur incapacité à rendre compte et surtout à expliquer les dispersions d'énergie à rupture en début de transition fragile-ductile. Afin de tenter de capter les phénomènes à l'origine de cette dispersion, le postulat est fait dans ces travaux que cette dispersion générale peut-être due :

- Aux dispersions de tailles de défauts initialement présents au sein de la microstructure ou se développant en cours de déformation plastique, ce qui est communément admis par la communauté de la mécanique de la rupture, et sera détaillé au chapitre V.
- Aux hétérogénéités des champs mécaniques présents au sein même de la microstructure. Le phénomène étudié, le clivage, étant généralement considéré comme associé aux mécanismes de déformation (pour le stade d'initiation) et d'augmentation locale de la contrainte (pour le stade de propagation)

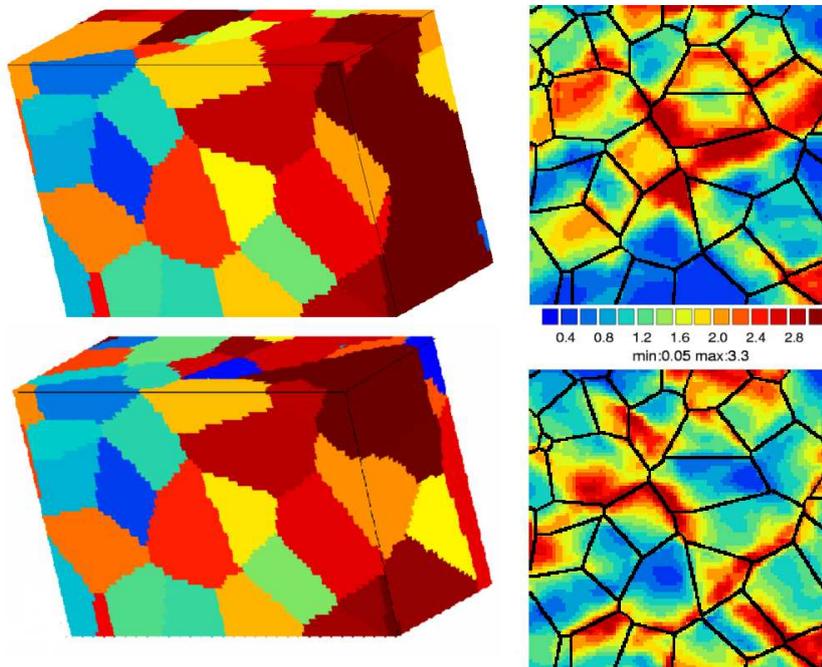


FIG. IV.9 – Champ de déformation plastique sur une surface donnée imposée pour deux microstructures sous-jacentes différentes et pour une déformation de traction de 2% [Zeghadi, 2005].

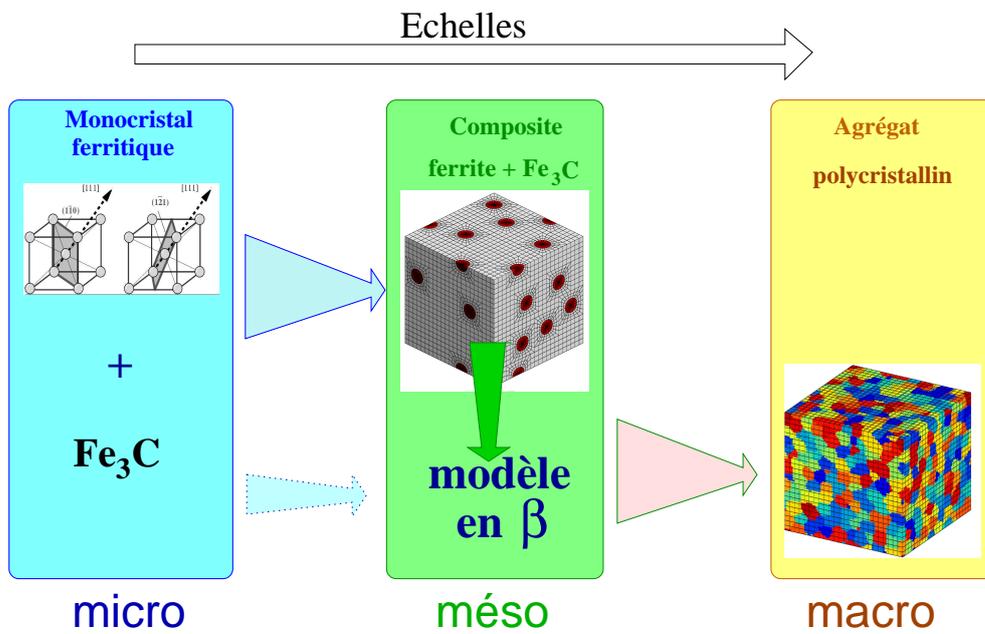


FIG. IV.10 – Représentation des trois échelles de modélisation et des outils de représentation mis en oeuvre.

Le but étant d'étudier les mécanismes de clivage de la ferrite, il sera choisi d'utiliser une modélisation qui nous donne accès aux champs de contraintes au sein de la phase ferritique. Puisque les mécanismes de déformation observés au chapitre III.3.2 nous montrent que les hétérogénéités des champs mécaniques peuvent être imputées aux deux effets "composite" et "polycristal", la modélisation devra aussi rendre compte de ces effets.

Ces considérations nous donnent une idée de l'échelle inférieure de représentation (la première contrainte évoquée ci-dessus) : la ferrite et ses états locaux de contrainte et de déformation.

La deuxième contrainte est celle de la taille du domaine à représenter : à l'échelle supérieure, l'effet composite sera pris en compte. Afin de représenter aussi bien que possible l'effet de la cémentite sur la matrice ferritique, une démarche de transition d'échelles permet de passer à l'échelle de la bainite, et donc du mélange ferrite cémentite.

Enfin, le calcul d'agrégats par EF permet de représenter l'effet polycristal, non seulement en termes de comportement global, mais surtout en termes d'hétérogénéités au sein d'un même "grain".

Le volume élémentaire représentatif maximal sera donc limité par la puissance et les temps de calculs. Il s'avère qu'en fait, les choix mènent à un volume élémentaire de bainite représenté raisonnable pour l'identification du comportement, et en concordance avec les volumes élémentaires utilisés par l'approche locale de la rupture : on se fixe ainsi une taille de domaine à représenter

La démarche multi-échelles appliquée dans les travaux qui suivent est symbolisée en figure IV.10, avec une représentation des trois échelles (matrice ferritique, monocristal de bainite et polycristal).

On rappelle que chacune de ces échelles donne lieu à une modélisation propre, mais incluse dans l'échelle supérieure par un processus d'homogénéisation semblable à ceux évoqués précédemment. Les sections suivantes ont pour but de détailler les raisons ayant guidé les choix de modélisation effectués à chaque échelle.

Enfin, la procédure d'optimisation des paramètres des différents modèles sera évoquée : certains paramètres étant choisis ou connus *a priori*, et d'autres devant être identifiés.

IV.3.2 Le monocristal de ferrite

On décrit ici les raisons qui ont guidé les choix de modélisation de la ferrite.

a) Plasticité

C'est la valeur du glissement et sa valeur cumulée sur un système qui seront retenues comme variables internes. Le comportement recherché étant élastoplastique, l'utilisation d'une loi élastoplastique semble de prime abord évidente. Toutefois, pour des raisons de réduction des temps de calcul, l'utilisation d'une loi de type élasto-viscoplastique à

Déformation totale	$\underline{\underline{\varepsilon}} = \underline{\underline{\varepsilon}}^e + \underline{\underline{\varepsilon}}^p$
Déformation élastique	$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\mathbf{C}}}: \underline{\underline{\varepsilon}}^e$
Déformation plastique	$\underline{\underline{\varepsilon}}^p = \sum_{g=1}^{24} \gamma^g \underline{\underline{\mathbf{R}}}^g$
Taux de glissement	$\dot{\gamma}^g = \left(\frac{ \tau^g - \tau_c^g}{K} \right)^n \cdot \text{signe}(\tau^g)$
Ecrouissage isotrope	$\tau_c^g = \tau_{c0}^g + Q^g \sum_{h=1}^{24} h^{gh} \cdot (1 - e^{-b^g \cdot \gamma_{cum}^h})$

TAB. IV.2 – Équations constitutives de la modélisation micromécanique élasto-viscoplastique de la ferrite.

faible viscosité permet d'obtenir des résultats pour toutes les variables du monocristal comparables à un comportement élastoplastique. Ce point a été vérifié (annexe A-IV.2).

b) Ecrouissage

L'écrouissage isotrope est choisi avec formulation exponentielle, similaire à la formulation donnée à l'équation 4.19. Celle-ci permet en effet d'introduire une saturation de l'écrouissage effectivement observée lors d'essais sur monocristaux.

La prise en compte de l'écrouissage cinématique est possible, mais devant le manque d'information disponible en termes d'essais cycliques sur le matériau considéré, il semble illusoire d'espérer pouvoir obtenir un jeu de coefficients satisfaisant. La plupart des chargements envisagés dans les modélisations à venir n'est, de toute façon, pas cyclique.

La matrice d'écrouissage, ainsi que l'illustration de l'effet de l'écrouissage exponentiel sont données à l'annexe A-IV.3. L'ensemble des équations constitutives du comportement élasto-viscoplastique de la ferrite sont rappelés au tableau IV.2.

IV.3.3 Le composite ferrite-cémentite

a) Le problème de la prise en compte de la cémentite

Les diverses observations in-situ, ainsi que les mesures par DRX montrent un rôle non négligeable de la cémentite, qui influe fortement sur la répartition des contraintes. Ainsi, la faible fraction volumique suffit à entraîner une forte différence entre la contrainte dans le matériau bainitique, et la ferrite.

La morphologie complexe du composite ferrite-cémentite (structure en amas de carbures) ainsi que le manque de données concernant la fraction volumique de cémentite, déjà évoquée au chapitre II.1.1.c) posent toutefois plusieurs problèmes.

Tout d'abord, le choix d'un modèle représentant correctement la répartition des phases, et surtout la distribution des champs mécaniques au sein de ces phases est difficile. Dans ses travaux de thèse, Raphaël Pesci avait choisi d'utiliser un modèle de Mori-Tanaka pour représenter la cémentite comme un ensemble d'inclusions plongées dans la ferrite.

Le problème posé par cette approche est la difficulté à reproduire la différence de contrainte observée expérimentalement en DRX au cours d'essais de traction, y compris en considérant des fractions volumiques largement surestimées (jusqu'à 20% de cémentite pour approcher une différence de contrainte réaliste en traction) par rapport au maximum théorique [Pesci, 2004].

Cela s'explique simplement par le fait que les inclusions de cémentite ne sont pas à proprement parler "diluées" dans la matrice ferritique, mais bien présentes sous la forme d'amas.

Face à cette constatation, une démarche à deux échelles a été proposée par Pesci [Pesci et al., 2006]. Deux phases sont considérées : la ferrite peu chargée et une ferrite très chargée, elle-même biphasée à 33% de cémentite. Cette nouvelle démarche permet de mieux traduire la différence de chargement entre ferrite et cémentite pour une fraction volumique toujours surestimée (5%). Il faut toutefois remarquer qu'on se situe aux limites communément admises de validité de la formulation de Mori-Tanaka en ce qui concerne la fraction volumique d'inclusions.

b) Modélisation du biphasé ferrite-cémentite

Représentation de la structure en amas Une approche de type transition d'échelles analytique s'est rapidement imposée comme le seul choix possible. Il n'est pas raisonnable de se tourner vers des approches plus complexes (calculs éléments finis à plusieurs échelles type FE² [Feyel et Chaboche, 2000] par exemple) dans ce cas précis.

Devant la faiblesse des approches concernant les composites classiques pour reproduire la différence de contrainte entre les constituants, le modèle en β a été choisi pour la possibilité qu'il offre d'ajuster l'écroûissage intraphases au travers de ses paramètres d et δ . Comme rappelé précédemment, ce modèle nécessite toutefois d'être calé sur des calculs EF utilisant une représentation la plus fidèle possible de la microstructure et dans notre cas de sa morphologie.

Le problème principal concerne la façon de prendre en compte la morphologie en amas. Comme il a été montré au chapitre III.3.2, celle-ci ne mène pas à un effet comparable à une morphologie où les carbures seraient "dilués" dans la phase ferritique. On peut aussi supposer que la matrice ferritique située à l'intérieur même de l'amas ne voit pas les mêmes sollicitations macroscopiques que le reste de la ferrite. On choisit de représenter cette morphologie en prenant en compte non pas uniquement les carbures, mais bien les amas, en incluant la matrice ferritique comprise dans l'ellipsoïde formée par l'amas. Comme ces ellipsoïdes ne semblent pas avoir d'orientation préférentielle (plutôt une répartition aléatoire associée à la croissance des lattes), et que l'on souhaite utiliser un maillage par EF pour déterminer les coefficients d et δ , on approxime ces ellipsoïdes par des sphères. Cette démarche de simplification de la microstructure est illustrée à la figure IV.11. Par ailleurs, on utilise des sphères de même volume, et non pas des tailles dispersées ce qui ne perturbe pas la représentation des champs mécaniques [Bilger, 2003].

Il est donc envisagé de considérer deux phases à cette échelle de représentation : la ferrite et les amas de carbures (clusters). La fraction volumique de cémentite reste inconnue ; la fraction volumique “d’amas” à utiliser l’est aussi. On en fait donc un des paramètres de la modélisation : en effet, le choix d’une certaine fraction volumique d’amas influera directement sur la différence de contrainte entre la matrice ferritique, et l’ensemble amas+ferrite. Cette influence se retrouve par la suite lors de l’identification des coefficients d et δ .

Génération des maillages de motif représentatif : Une routine a été créée avec l’outil de maillage GIBI, afin de créer des maillages réguliers, dans lesquels on peut choisir aléatoirement une partie du maillage (cellule cubique 3D) qui sera remplacée par une autre cellule, respectant les positions des noeuds au contour et à l’intérieur de laquelle est maillée une inclusion sphérique. Ainsi, en jouant sur le nombre de sphères introduites dans le maillage et sur leur rayon, on peut créer un maillage tel que celui présenté à la figure IV.12, et jouer sur la répartition et la fraction volumique d’amas.

La fraction volumique d’amas de cémentite prise en compte, qui est inconnue, devient un paramètre de la modélisation, qui interviendra non seulement dans la transition d’échelles utilisant le modèle en β , mais aussi lors de la génération des maillages utilisés pour les calculs éléments finis qui servent à ajuster les paramètres de ce modèle. Nous vérifierons lors de la phase d’optimisation des paramètres que la valeur pour cette fraction volumique obtenue reste raisonnable.

Le but est de caler les paramètres du modèle en β du composite {ferrite+amas} sur des calculs EF. Afin de ne pas prendre un cas particulier pour l’identification, il a été choisi une orientation arbitraire dont on peut affirmer qu’elle n’est pas symétrique par rapport aux chargements imposés :

$\varphi_1 = 18^\circ$	$\Phi = 12^\circ$	$\varphi_2 = 82^\circ$
------------------------	-------------------	------------------------

Dès lors, l’identification se faisant sur une seule orientation de ferrite, on ne peut affirmer par avance que le comportement du composite sera isotrope : les composantes macroscopiques de cisaillement ne sont pas négligeables.

Les Conditions Aux Limites (CAL) de Déformation Homogène au Contour (DHC) sont utilisées (voir annexe A-III.2). Elles permettent d’imposer proprement un tenseur de déformation qui ne sera pas isotrope sur la surface du composite.

IV.3.4 L’agrégat polycristallin

a) Maillage

La technique de génération de microstructures a donc été choisie pour représenter le polycristal. Toutefois, les maillages doivent respecter certaines conditions de discrétisation pour être utilisables dans cette optique.

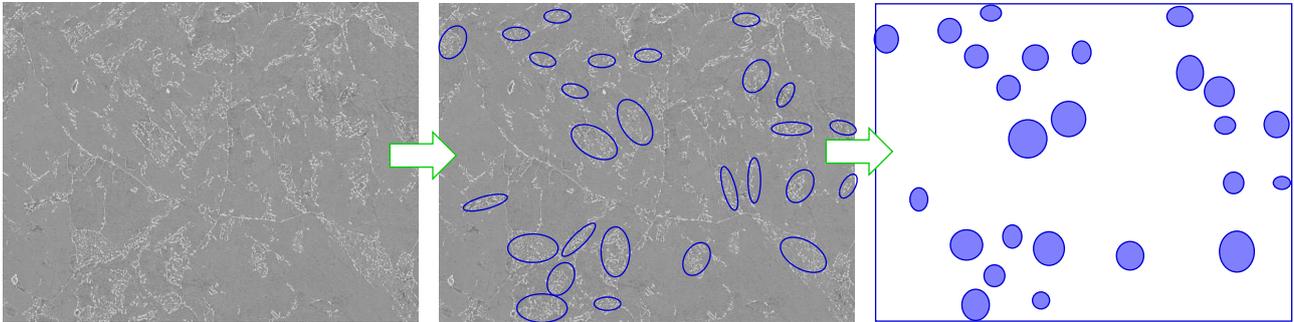


FIG. IV.11 – Illustration de la démarche de simplification de la représentation de la morphologie en amas de carbures.

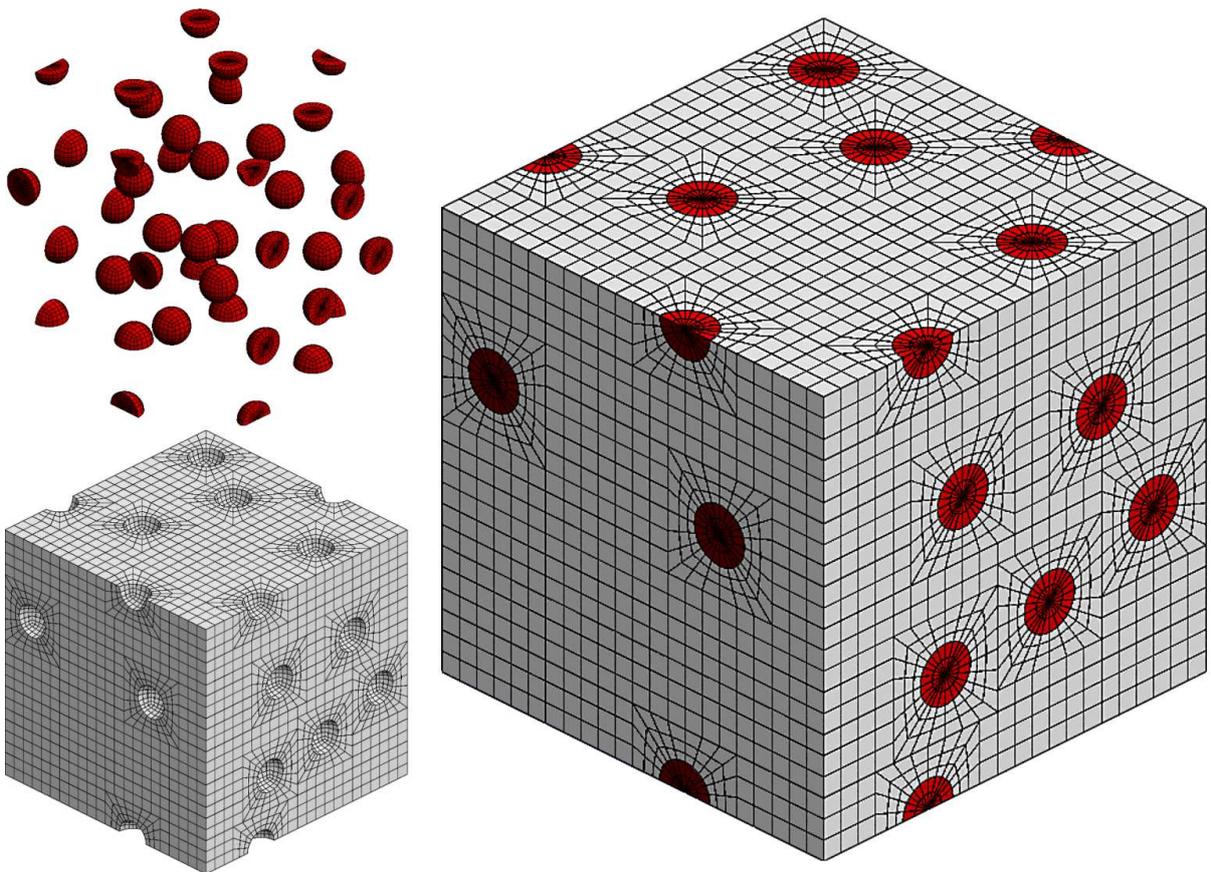


FIG. IV.12 – Constitution du maillage du motif représentatif choisi pour représenter les amas de carbures (en rouge) dans la ferrite (en gris). Maillage à 3% d'amas comportant environ 22000 éléments hexahédriques à 27 points de Gauss.

Deux types de maillages ont ainsi été générés dans ces travaux, en utilisant les techniques de génération de maillages de microstructures évoquées au paragraphe IV.2.4 :

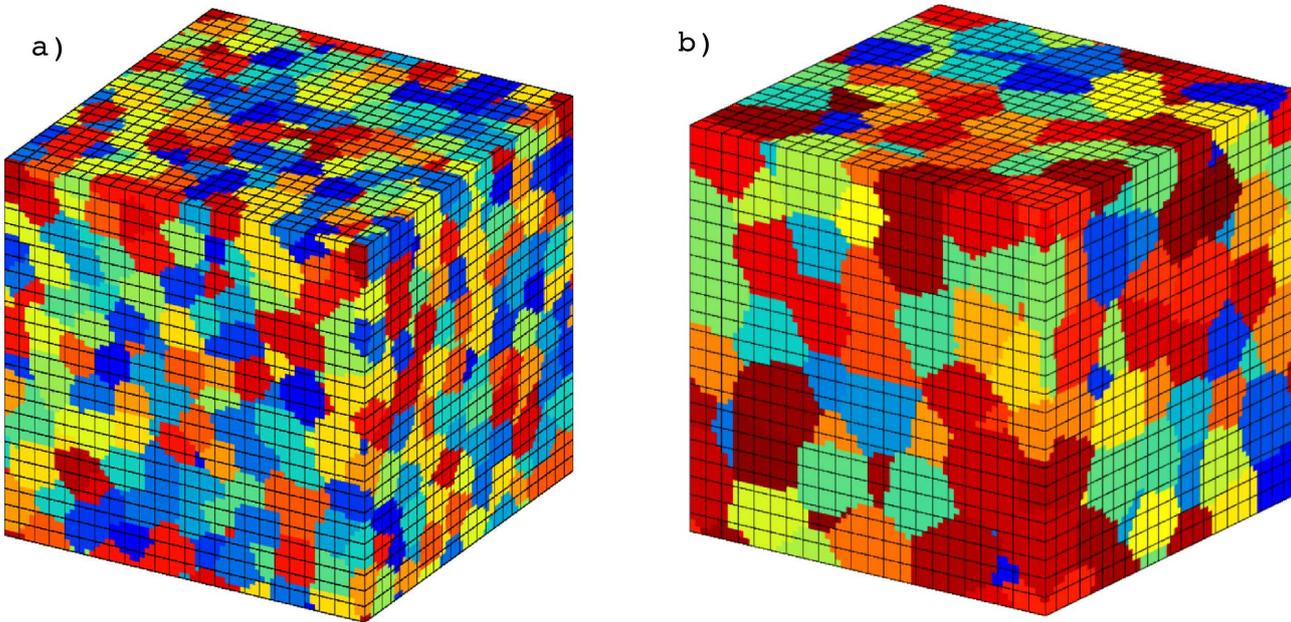
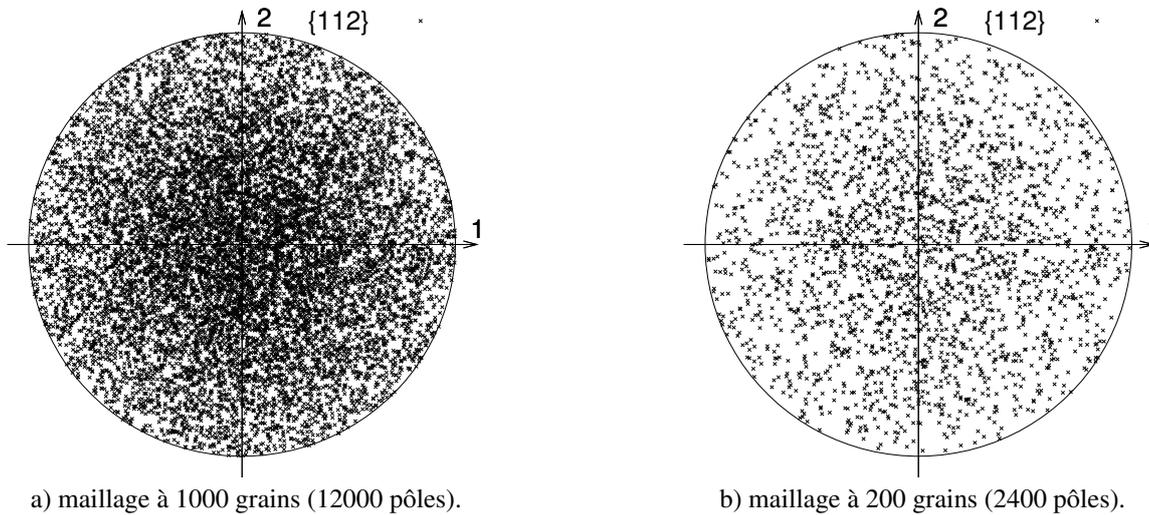


FIG. IV.13 – Les deux maillages générés : a) maillage 24x24x24 éléments à 1000 grains. b) maillage 22x22x22 éléments à 200 grains.



a) maillage à 1000 grains (12000 pôles).

b) maillage à 200 grains (2400 pôles).

FIG. IV.14 – Figures de pôles associées aux deux agrégats de la figure IV.13.

- Un maillage relativement "gros" mais suffisant pour l'identification de la loi de comportement en regard des conclusions de [Barbe, 2000]. Ce maillage sera le maillage de travail pour tout le reste de ce chapitre. Il comporte 1000 grains, et est composé de 24x24x24 éléments hexaédriques à 27 points d'intégration. On aboutit à environ 370 points d'intégration par grain, ce qui est un peu faible pour obtenir une

bonne description des moyennes par grains, mais largement acceptable pour identifier la loi de comportement.

- Un maillage plus fin, mieux discrétisé, mais comportant moins de grains, qui servira lui pour les calculs utilisés au chapitre suivant pour l'approche traitant de la rupture par clivage. Ce maillage comporte 200 grains et est par ailleurs composé de $22 \times 22 \times 22$ éléments (les conditions aux limites utilisées nécessitant d'utiliser un maillage légèrement plus petit). Il comporte ainsi environ 1430 points d'intégration par grain, ce qui permet de se rapprocher de la discrétisation préconisée pour estimer les champs mécaniques intragranulaires.

Un tirage d'orientations aléatoire a ensuite été effectué afin d'obtenir une distribution de triplets d'angles d'Euler amenant à une texture isotrope, comme montré en figure IV.14 pour les deux maillages générés. Afin d'être isotrope, les tirages se feront sur trois variables aléatoires selon les répartitions suivantes :

$$\varphi_1 \text{ uniforme sur } [0; 360], \varphi_2 \text{ uniforme sur } [0; 360], \text{ et } \cos\Phi \text{ uniforme sur } [-1; 1] \quad (4.39)$$

b) Conditions Aux Limites

Les CAL utilisées dans le cadre des identifications seront relativement simples : chaque face se verra imposer des conditions de DNI (voir annexe A-III.2). Ces conditions sont relativement valables puisque l'agrégat reste macroscopiquement isotrope. Les déplacements imposés aux contours ont été déterminés à chaque fois par un calcul préalable sur un élément fini test pour lequel le comportement était celui d'un modèle BZ dans lequel on avait repris le même jeu d'orientations mais aussi les mêmes fractions volumiques par orientation. L'utilisation de cette technique possède en outre l'avantage de permettre un ajustement plus rapide des paramètres optimums lors de la phase d'identification.

IV.3.5 La procédure d'identification et d'optimisation des paramètres

La démarche multi-échelles mise en place fait intervenir un certain nombre de paramètres. On pourra de manière raisonnable en choisir certains en se basant sur des résultats admis de la littérature, voire borner ceux qui restent inconnus afin de faciliter la procédure d'identification. La partie suivante explique ces choix, et récapitule les paramètres inconnus en début d'optimisation.

a) Choix de certains paramètres

- **Comportement des amas de cémentite** : Les amas de cémentite sont considérés comme élastiques au cours de la déformation. Étant constitués d'un mélange entre ferrite et cémentite, qui possèdent des caractéristiques mécaniques très proches de

celles des aciers, on attribue aux amas des paramètres d'élasticité isotrope communs pour les aciers : $E = 210000 \text{ MPa}$ et $\nu = 0,3$

- **Comportement de la ferrite** : Pour l'élasticité, on reprendra les mêmes valeurs que précédemment, sauf précision : $E = 210000 \text{ MPa}$ et $\nu = 0,3$.

Comme il l'a été dit, on ne s'intéressera pas aux chargements cycliques, ce qui permet d'éliminer d'emblée l'écrouissage cinématique et de donner $c = 0$ et $d = 0$.

Les paramètres de viscosité de la loi de glissement ont été déterminés (voir annexe A-IV.2) afin de minimiser l'effet visqueux, ce qui permet de donner $K = 5$ et $n = 12$.

L'écrouissage, régi par la matrice h^{gh} , est ajustable par le biais de 4 paramètres (voir annexe A-IV.3. Il semble illusoire de vouloir caler ces paramètres de manière autre que qualitative. Ainsi ces paramètres ont été choisis de manière à favoriser le glissement sur les systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{110\}$ (h_3 et h_4 supérieurs à h_1 et h_2), mais aussi afin de différencier les termes d'écrouissages forts et faibles (h_2 et h_4 supérieurs respectivement à h_1 et h_3). On obtient donc : $h_1 = 1$, $h_2 = 1,15$, $h_3 = 1,2$ et $h_4 = 1,4$

Il reste donc à identifier **3 paramètres matériaux inconnus** τ_{c0} , Q et b qui seront pris comme dépendants de la température.

- **Modèle d'homogénéisation en β** : On a choisi d'approximer les formes des amas de cémentite par des sphères. Le **tenseur d'influence** utilisé dans la modélisation sera donc celui du modèle de Kröner pour une phase sphérique donné à l'équation 4.30. Les coefficients δ et D **restent à identifier** à l'aide des calculs EF sur maillage de composite. Enfin la **fraction volumique f_v de cémentite** est un paramètre à identifier, bien que les constatations du chapitre II amènent à considérer **une limite supérieure de 0,1**.

b) L'optimisation : une démarche itérative

On voit donc qu'il reste deux principaux groupes de paramètres à optimiser : d'un côté ceux qui concernent le comportement de la ferrite (avec un jeu de trois paramètres par température), et de l'autre ceux qui concernent la représentation du biphasé ferrite-cémentite. Il a été remarqué au cours des travaux d'optimisation que les paramètres δ et D du modèle en β n'étaient pas très sensibles aux petites variations des paramètres du comportement de la ferrite, ni aux variations de f_v . En outre, il a été constaté qu'ils pouvaient être pris identiques pour les différentes températures. Ne disposant pas de données fiables concernant la fraction d'amas f_v , il a été décidé de la caler afin d'obtenir une différence de contrainte macroscopique entre bainite et ferrite comparable à ce qui est obtenu en DRX.

La procédure d'identification exposée ci-après a donc été appliquée pour tous les paramètres à -150°C . Les valeurs de δ et D et f_v ont ensuite été fixées pour les autres températures (-120°C , -90°C et -60°C), ne laissant plus que les trois paramètres τ_{c0} , Q

et b à identifier, ce qui sera facilité par l'utilisation de calculs de type BZ en première approximation.

On notera tout de même que la procédure, exposée sous forme d'organigramme à la figure IV.15 est relativement complexe, faisant intervenir divers niveaux de calculs. Ces calculs sont eux-mêmes très longs (de l'ordre de la semaine pour les calculs de composites EF ou pour les agrégats EF avec biphasé en β aux points d'intégration). Pour cette raison, le recours à un module d'optimisation automatisé [Pilvin, 1988] n'a pas été envisagé.

c) Les paramètres identifiés : résultats de l'optimisation

On remarque que malgré une démarche de modélisation relativement lourde, il reste peu de paramètres à identifier, ce qui tient au choix délibéré de modèles simples. Le jeu de paramètres identifiés, ainsi qu'un rappel de l'ensemble des paramètres utilisés dans les modélisations, est donné au tableau IV.3.

Paramètres choisis ou connus									
E	ν	n	K	c	d	h_1	h_2	h_3	h_4
210 GPa	0,3	5	12	0	0	1	1,15	1,2	1,4

Paramètres identifiés (comportement ferrite)			
T	Q	b	τ_{c0}
-60°C	3	90	204
-90°C	3,7	85	213
-120°C	4,1	60	231
-150°C	4,7	55	248

Paramètres identifiés (modèle β)		
D	δ	f_v
900	0,4	0,03

TAB. IV.3 – Les paramètres **identifiés** utilisés dans la suite des travaux.

L'évolution de la cission critique initiale dans la ferrite en fonction de la température suit la tendance des résultats de Taoka *et al.* [Taoka et al., 1964].

IV.4 Identification du comportement : validation des résultats

Il convient maintenant de s'assurer que le résultat de la procédure d'identification est correct aux différentes échelles de représentation. Pour le comportement global, la démarche est relativement intuitive, et consiste à utiliser des résultats expérimentaux différents de ceux utilisés pour l'identification afin de vérifier qu'ils sont correctement reproduits. Pour le modèle en β calé sur des simulations EF, la démarche est bien évidemment différente : on a identifié les paramètres du modèle sur une simulation de

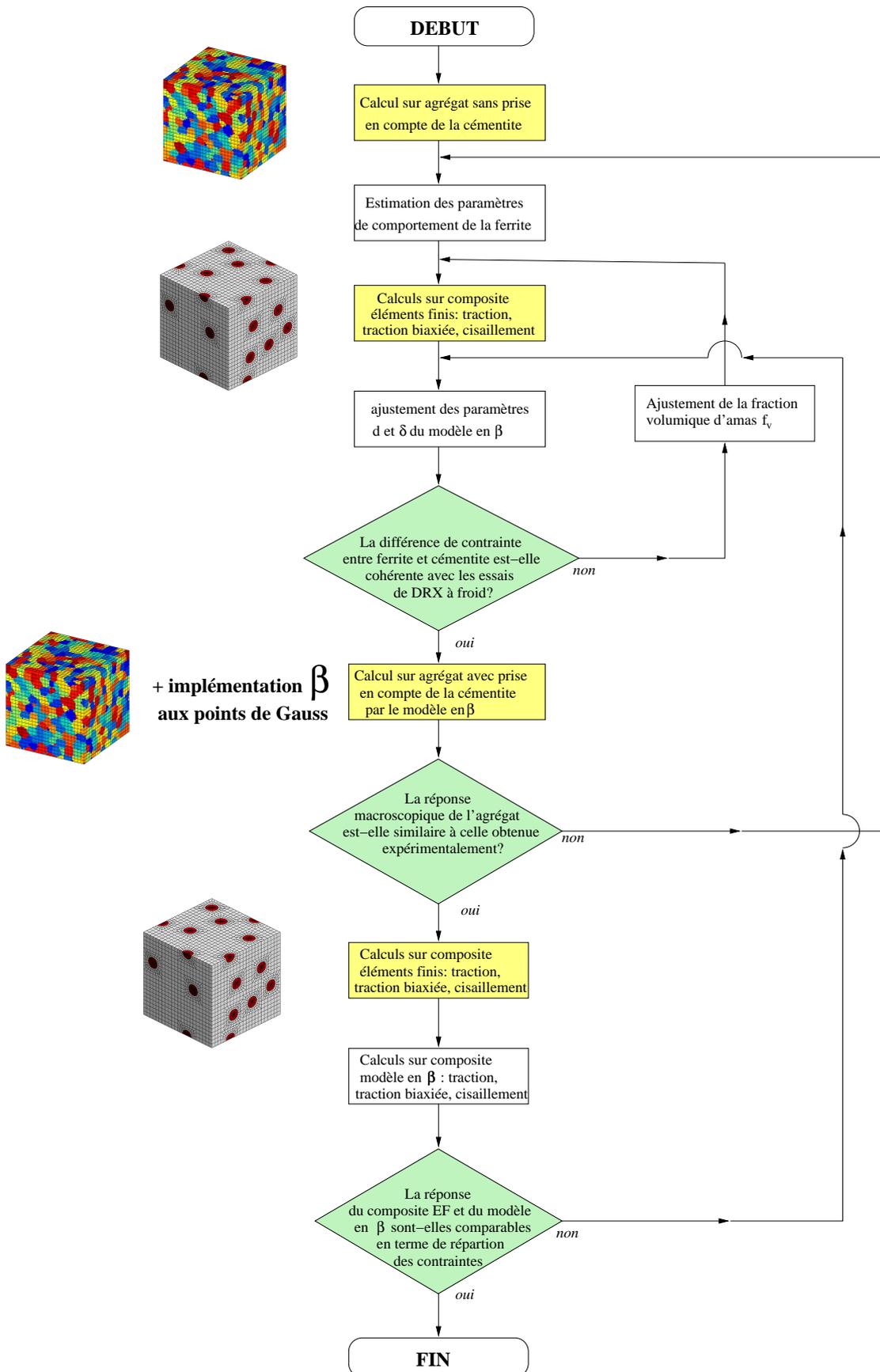


FIG. IV.15 – La procédure d'identification des paramètres à -150°C.

traction uniaxiale de la structure en amas. On vérifiera donc que d'autres chargements simulés sont eux aussi correctement reproduits par le modèle en β .

IV.4.1 Modélisation de l'effet "Composite"

a) Remarques générales préliminaires

Pour toutes les simulations EF qui suivent (y compris les simulations sur agrégats à 1000 grains utilisés pour l'identification de la loi de comportement), différentes remarques peuvent être formulées aidant à une meilleure compréhension des résultats présentés par la suite.

Les calculs de vérifications pour d'autres chargements (et donc pour des orientations différentes de la contrainte principale par rapport aux systèmes de glissement) menés par la suite permettront de valider ou non la démarche. On notera enfin que les résultats présentés sont ceux obtenus à la dernière itération de l'identification, soit avec le jeu de paramètres indiqués au tableau IV.3.

Correction du tenseur des contraintes : Lorsque la déformation plastique devient importante, on observe dans les zones à forts gradients de champs mécaniques des variations de pression très importantes (figure IV.16) au sein d'un même élément. Cet effet, déjà très largement décrit dans les approches locales de mécanique de la rupture [Tanguy, 2001, Besson et al., 2001b], reste un des problèmes ouverts actuels en éléments finis. Lorsque la déformation plastique augmente, le matériau devient quasi incompressible. La variation de déformation élastique sur l'élément est donc très faible à chaque incrément de calcul, et il devient difficile d'un point de vue numérique de calculer le champ élastique, et donc la pression avec une bonne précision.

Une solution au problème, évoquée notamment dans [De-Souza-Neto et al., 2005], consiste à utiliser des éléments à intégration réduite pour les calculs (par exemple des tétraèdres à 4 noeuds en 3D), voire à utiliser des éléments finis particuliers pour lesquels la trace du tenseur des contraintes est associée à un degré de liberté supplémentaire. Ces méthodes n'ont pas été utilisées (les éléments employés sont des hexaèdres à 20 noeuds et 27 points d'intégration). On rappellera que Barbe conseille pour sa part l'emploi d'éléments comportant un maximum de points d'intégration pour le calcul d'agrégats : les éléments à intégration réduite ont tendance à augmenter le besoin de discrétisation en calcul d'agrégats si l'on veut éviter de rigidifier le maillage. On a préféré à ces solutions en amont une méthode de post-traitement des résultats plus commode et qui donne des résultats quasi équivalents. Il suffit de calculer la pression moyenne dans chaque élément \bar{p} et la pression à chaque point d'intégration p , et d'écrire le tenseur des contraintes corrigées à chaque point d'intégration σ^* comme :

$$\sigma^* = \sigma + \mathbf{i}(\bar{p} - p) \quad \text{avec : } p = \frac{\text{tr}(\sigma)}{3} \quad (4.40)$$

Le résultat d'un tel traitement est visible à la figure IV.16. Les résultats ont effectivement une allure plus correcte en termes d'intensité maximale des contraintes et aussi plus régulière, mais on a perdu en discrétisation, le post-traitement de correction ayant tendance à moyenniser la contrainte sur chaque élément.

Ces constatations ne remettent de toute façon pas en cause la validité du calcul EF, mais bien celle du champ de contrainte défini aux noeuds.

L'effet des CAL de surface : On rappellera que dans le cadre des calculs sur modèle EF de la structure en amas, les CAL imposées sont de type DHC. La déformation au contour est donc complètement homogène. Ainsi, on devine que les observations de champs mécaniques ne doivent surtout pas se faire en surface, mais bien au coeur du maillage élément fini, sous peine d'avoir une interprétation fautive aussi bien en déformation (figure IV.18) qu'en contrainte (figure IV.17) : comme la déformation est homogène au contour, les incompatibilités y apparaissant vont créer de fortes sur-contraintes.

On observe bien sur la figure IV.18 que les hétérogénéités de déformation significatives sont observables à coeur. Enfin, la figure IV.17 permet de bien se rendre compte, sur la matrice ferritique, mais aussi sur les amas que les champs de contraintes observés en surface ne sont pas représentatifs des répartitions de contrainte à coeur. Il suffit en fait que l'inclusion ne soit pas coupée par la surface pour que la perturbation n'affecte quasiment pas son état mécanique et celui de la matrice alentour. On notera que dans la plupart des cas, l'allure du champ de contrainte et de déformation autour des inclusions partageant le même type de configuration vis-à-vis de la surface (coupé par la surface, à coeur...) est très semblable.

On pourrait dès lors penser qu'il aurait suffi d'éliminer les inclusions partiellement représentées à la surface du maillage pour éviter le biais dû aux effets de surface. Toutefois, on aurait alors très certainement observé une localisation de la déformation près de la surface du VER, les chemins de déformation facile apparaissant sur des plans où l'on intersecte peu d'amas, ce qui ne serait pas représentatif de la réalité.

A l'inverse, on peut aussi considérer que les incompatibilités amenées à la surface du VER par l'imposition d'une déformation homogène sont de même nature que celles amenées par les hétérogénéités aux joints de grains au sein de la microstructure réelle.

b) Comparaison des résultats EF/ β pour l'identification sur traction

Comportement en traction uniaxiale : Les figures IV.18 et IV.19 montrent respectivement la répartition des hétérogénéités de déformation et de contrainte. Les amas sont la plupart du temps très chargés en contrainte, peu déformés, et ne présentent que peu d'hétérogénéités. Il a été choisi de ne pas les représenter sur les vues générales.

On voit apparaître au sein de la ferrite des chemins de déformation plus intense IV.18, classiquement observés pour ce type de structures [Bilger, 2003]. Une comparaison avec

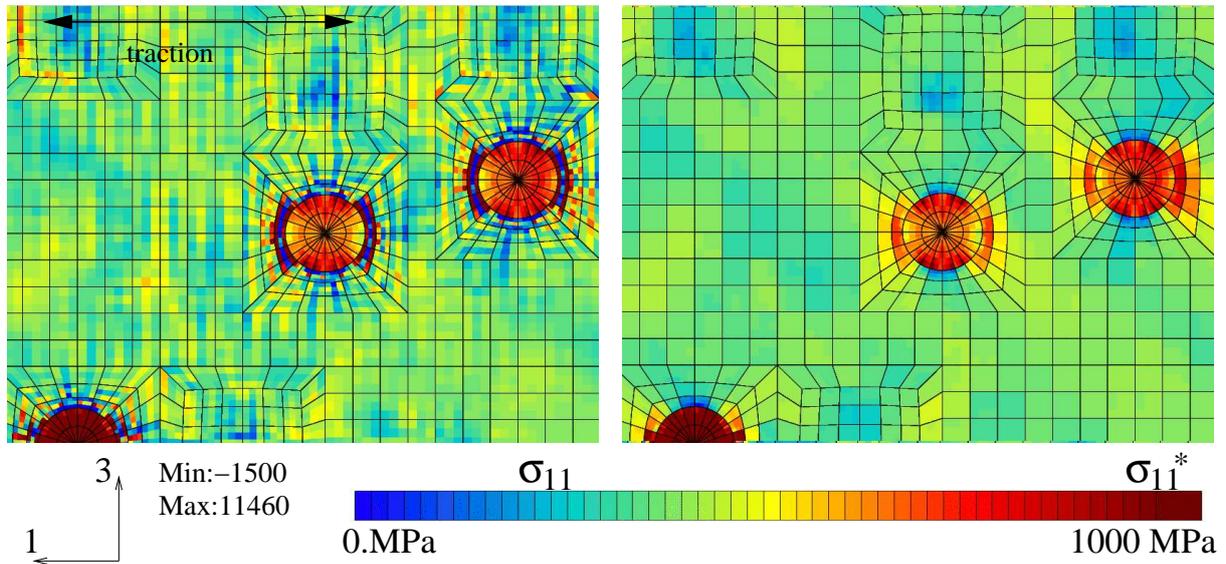


FIG. IV.16 – Illustration des perturbations de contrainte liées aux forts niveaux de déformation avec une coupe du calcul de traction simple. $\langle \varepsilon_{11} \rangle = 0,1$, $T = -150^\circ\text{C}$. Le champ corrigé σ_{11}^* est aussi présenté.

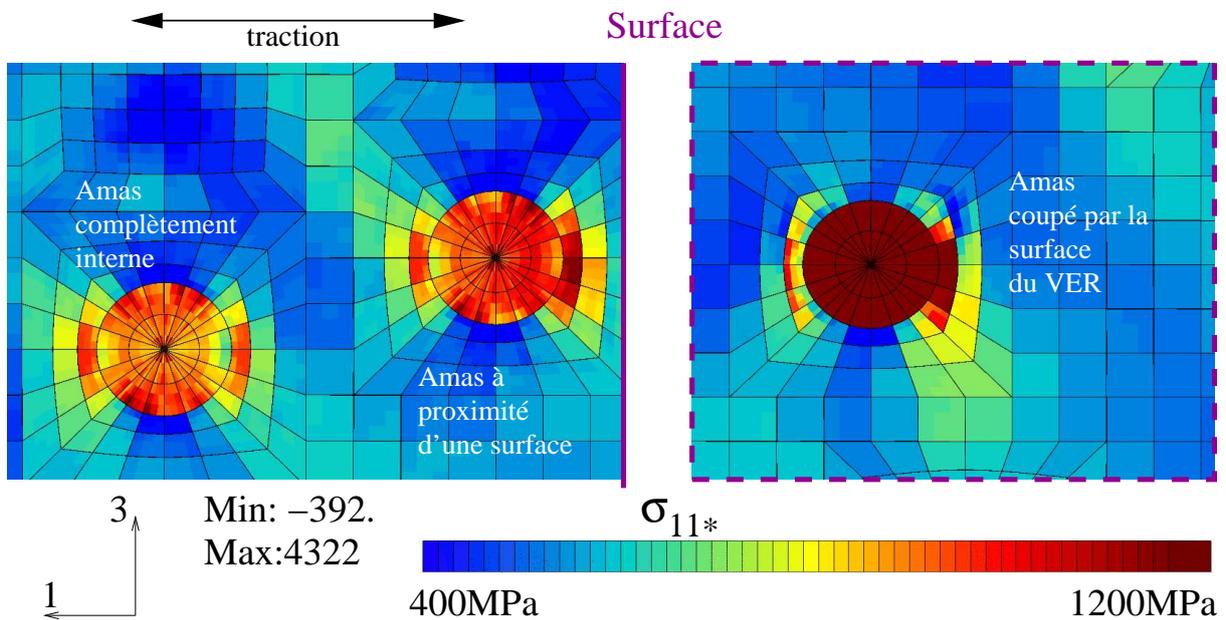


FIG. IV.17 – Illustration de l'effet des CAL sur le champ de la contrainte corrigée dans la direction de traction autour des inclusions. $\langle \varepsilon_{11} \rangle = 0,05$, $T = -150^\circ\text{C}$. Le champ est perturbé près des surfaces. L'allure du champ observé est très similaire entre les inclusions partageant la même position par rapport à la surface du VER.

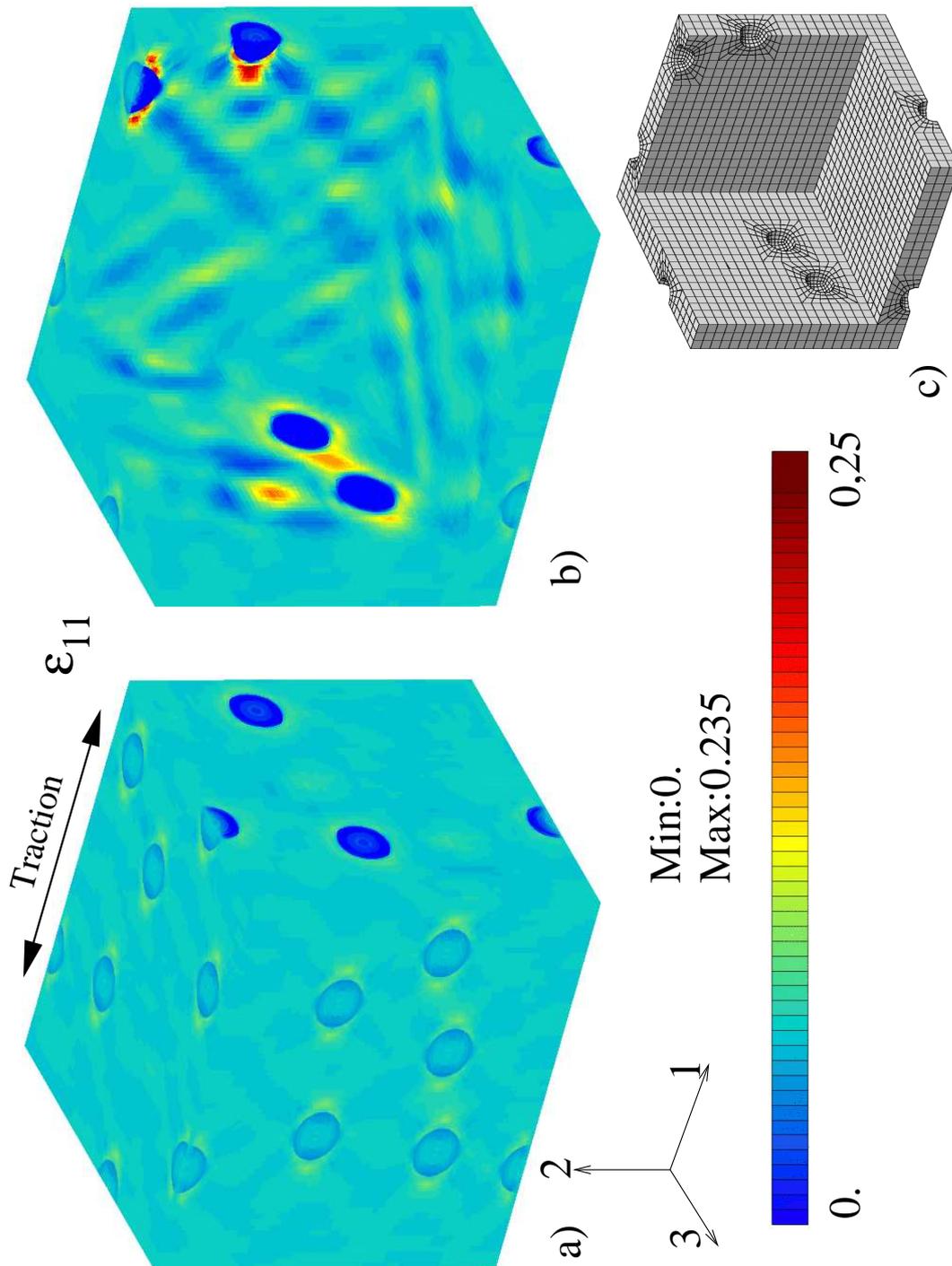


FIG. IV.18 – Illustration de l'effet des CAL sur la surface du VER. $\langle \epsilon_{11} \rangle = 0.05$, $T = -150^\circ\text{C}$. a) Champ de déformation dans la direction de traction visible à la surface. b) visible à coeur. c) la partie du maillage utilisée pour visualiser les champs mécaniques à coeur en b). Cette partie de maillage sera dorénavant utilisée pour présenter la plupart des résultats sur ce maillage.

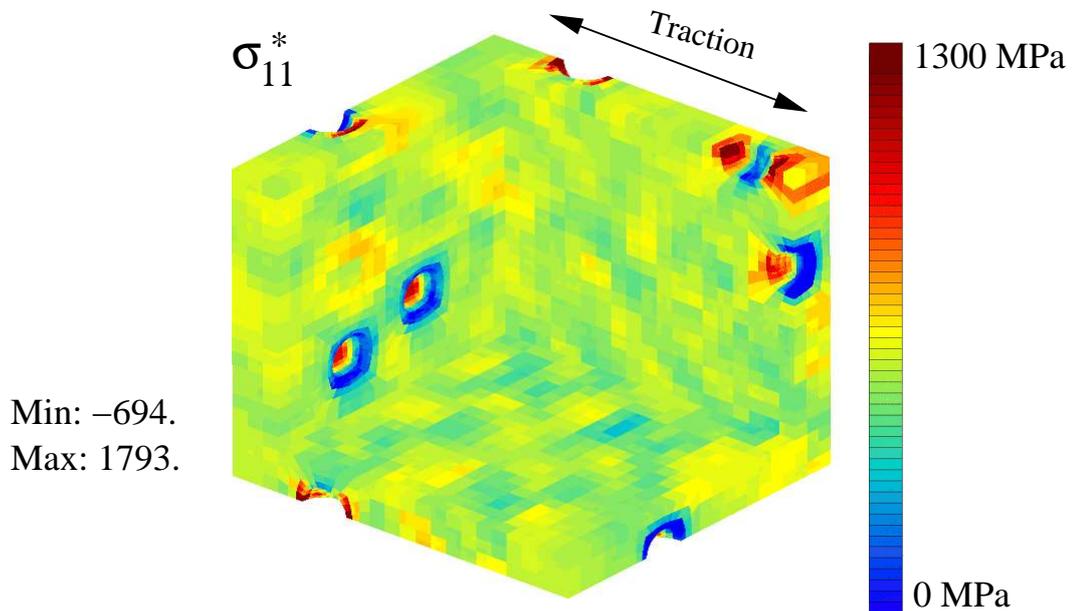


FIG. IV.19 – Le champ de contrainte dans la direction de traction observé à l’intérieur du VER pour la ferrite. $\langle \varepsilon_{11} \rangle = 0,05$, $T = -150^\circ\text{C}$.

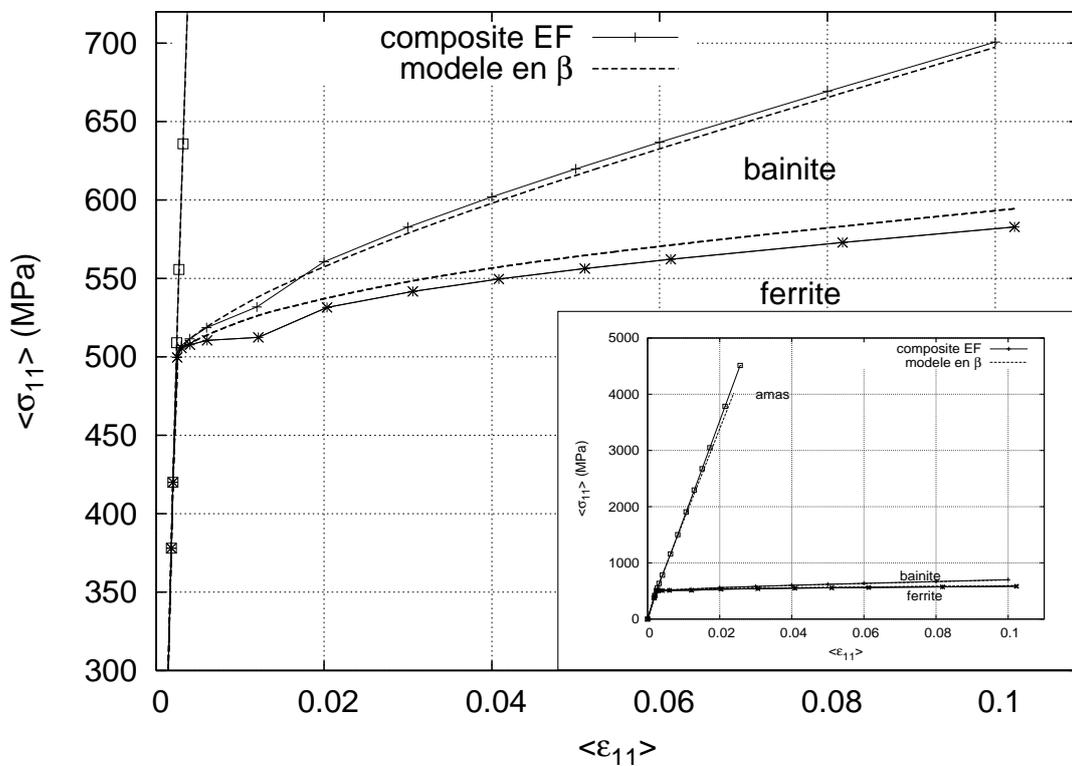


FIG. IV.20 – Courbes du comportement en traction uniaxiale des différentes phases : comparaison entre le modèle en β et le calcul EF. Les déformations représentées sont celles des phases, $T = -150^\circ\text{C}$.

la figure IV.19 montre que ces zones de forte déformation sont aussi les plus chargées en contrainte par un effet d'écrouissage de la matrice ferritique.

La figure IV.20 présente l'évolution des chargements par phase pour le modèle en β et en moyenne par phase pour le calcul EF. Dans l'ensemble, on constate que le comportement global du monocristal de bainite et les répartitions des contraintes par phases sont très bien reproduits du fait de l'identification.

On notera que les identifications ont été faites jusqu'à des niveaux de déformations relativement élevés pour une modélisation dans le cadre des petites déformations¹. Cette remarque vaut aussi pour toutes les autres modélisations présentes dans ces travaux.

Activation des systèmes de glissement : Il est intéressant de comparer l'évolution d'autres variables internes comme l'activation et l'amplitude du glissement sur les systèmes. Cette comparaison est faite à la figure IV.21.

On observe effectivement que les principaux systèmes activés dans la modélisation EF de la bainite pour l'orientation choisie sont aussi les seuls systèmes activés pour la modélisation en β . Toutefois, on remarque que l'intensité du glissement cumulé est toujours un peu plus faible pour les EF que pour le modèle en β .

Une visualisation de tous les glissements sur le calcul EF donne un début d'explication : les champs mécaniques étant fortement affectés par la présence des amas élastiques, on active localement autour de ceux-ci beaucoup de systèmes de glissement qui ne sont pas, au sens de la cission résolue du système par rapport à la contrainte sur le VER, des systèmes "activables"². Un exemple est visible sur la figure IV.21, qui montre l'allure des glissements principaux mais aussi d'un de ces glissements secondaires, activé autour des amas. L'activation de tous ces systèmes secondaires diminue donc "le besoin" pour les systèmes principaux de glisser pour accommoder la déformation. Les résultats n'en sont pas moins tout à fait satisfaisants.

Par ailleurs, si l'on trace la somme sur la ferrite de toutes les moyennes des glissements (figure IV.21.b) pour les deux représentations, on constate cette fois des résultats équivalents pour le motif EF et le modèle en β .

Contraintes latérales par phase et dans la bainite : Enfin, puisque l'on impose aux deux modélisations le même tenseur de déformation, et que les résultats sont calés sur les contraintes dans la direction de traction, on peut comparer l'évolution des contraintes latérales, en moyenne et dans les phases prédites par le modèle en β avec celles de la modélisation EF. Cette comparaison est effectuée par phase à la figure IV.22

Des différences de l'ordre de 50 MPa apparaissent entre les valeurs prédites par le modèle en β et les valeurs prédites par la simulation EF, que ce soit en moyenne par phases ou

¹ On estime généralement être en grande déformation à partir de 6% de déformation équivalente.

² En ne perdant pas de vue que ce qui se passe à la proximité d'une inclusion dure réelle doit être plus proche de ce qui est modélisé ici par éléments finis que ce que prévoit l'hypothèse de Schmid couplée à un MCM.

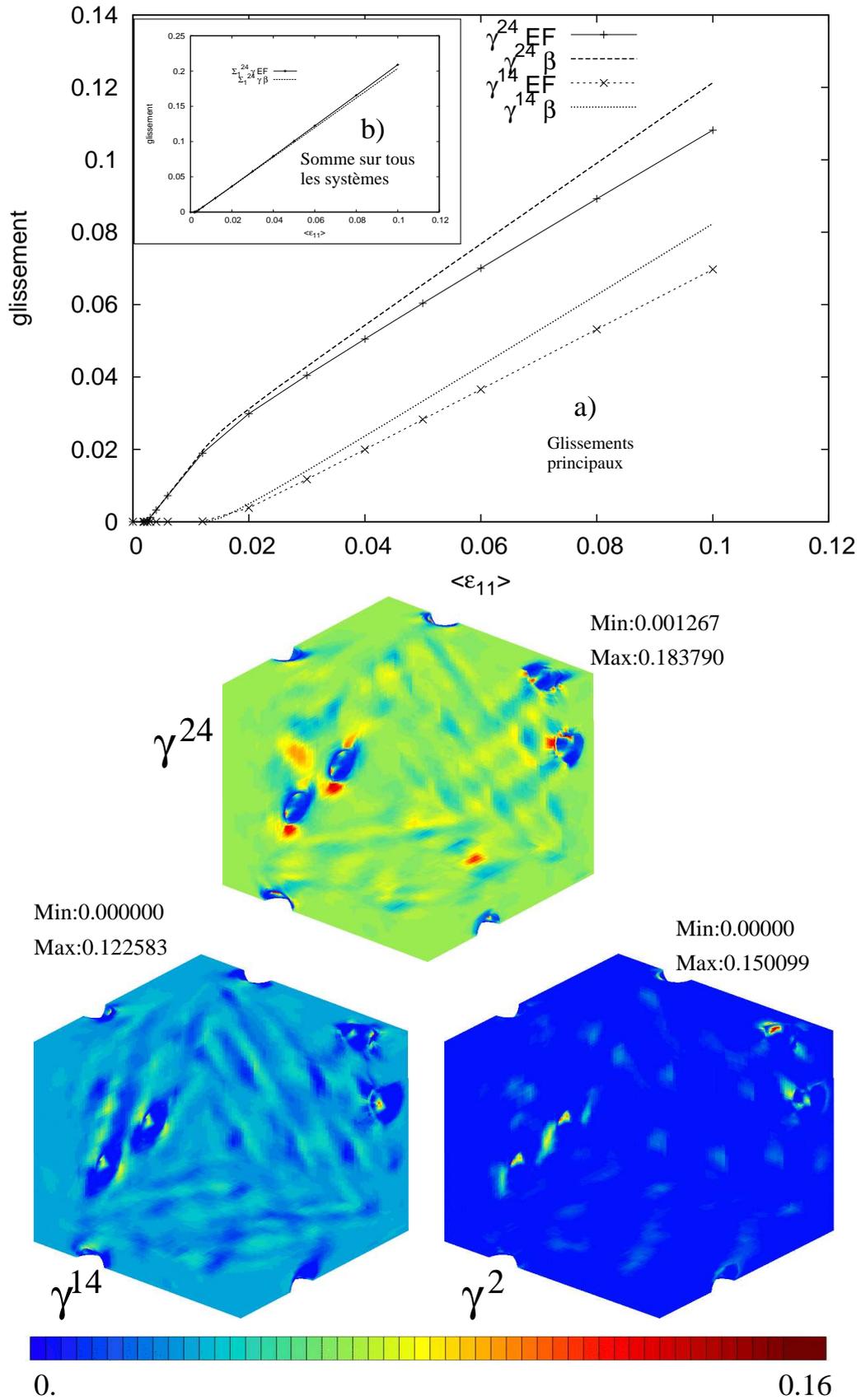


FIG. IV.21 – Comparaison des intensités de glissement cumulé pour la traction uniaxiale et selon l’orientation choisie : a) sur les systèmes principaux activés. b) somme des glissements cumulés sur les 24 systèmes. Cartographies à l’intérieur du VER des systèmes de glissement activés en traction : principaux (24 et 14) et secondaires (2). $\langle \epsilon_{11} \rangle = 0, 1$, $T = -150^\circ\text{C}$

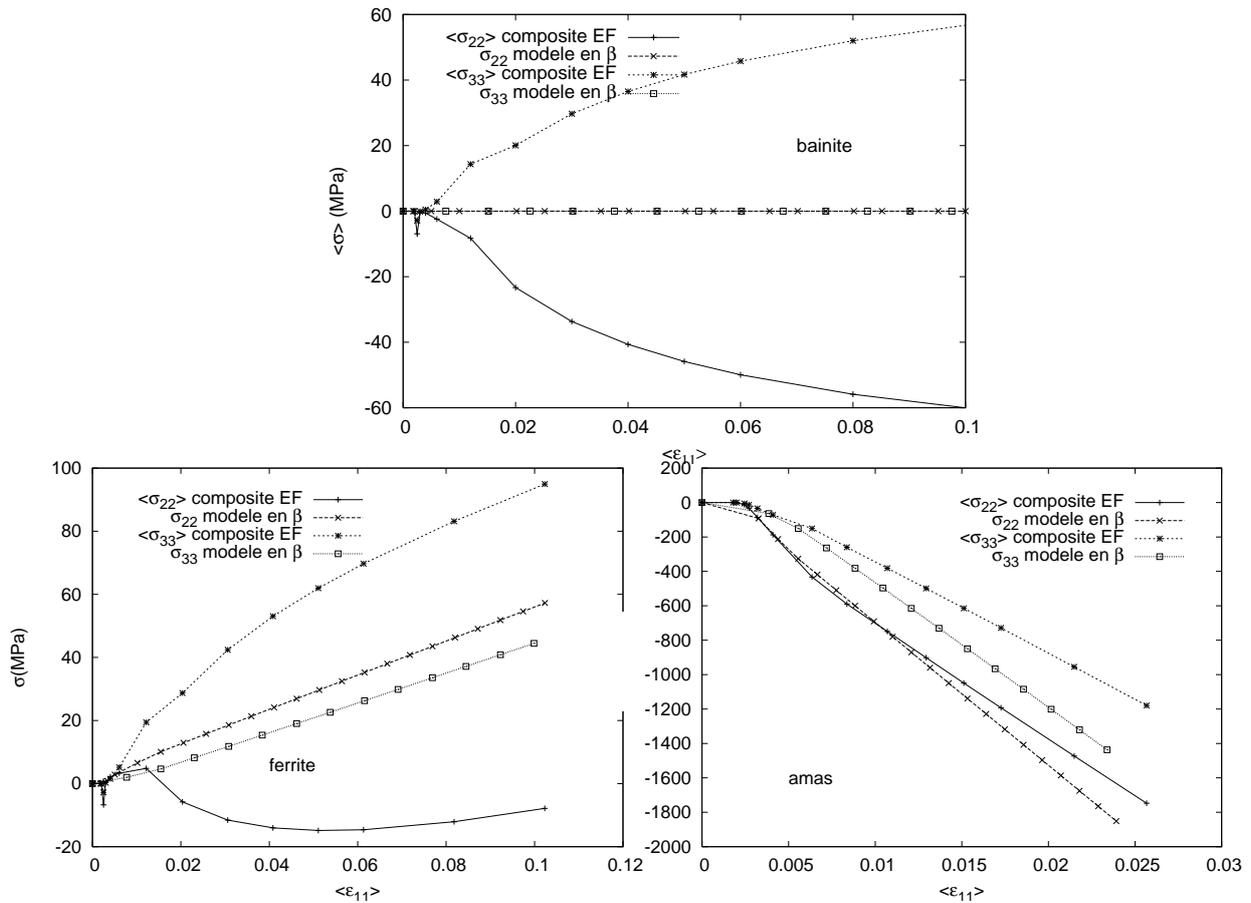


FIG. IV.22 – Comparaison des contraintes latérales prédites par le calcul EF et le modèle en β pour les différentes phases pour les calculs en traction uniaxiale.

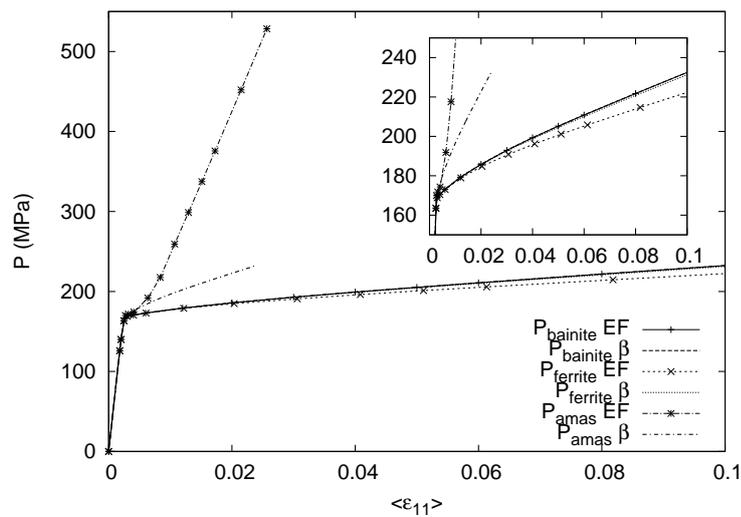


FIG. IV.23 – Représentation des niveaux de pression par phase et dans la bainite pour le cas de la traction uniaxiale. Comparaison entre le modèle en β et le motif calculé par EF. Les déformations sont celles des phases

macroscopiquement. Les tendances sont respectées, même si le modèle en β atténue les contraintes transverses.

Pression dans les phases : La figure IV.23 présente les résultats en termes de pression moyenne par phase pour le calcul EF, et pour le modèle en β .

La répartition des pressions est satisfaisante : elle est correctement prédite pour la bainite et la phase ferritique (qui voient quasiment des pressions identiques), et la tendance est respectée pour la cémentite.

c) Validation du calage du modèle en β pour d'autres chargements

Comportement en traction biaxiée et en cisaillement : Les figures IV.24.a) et b) et IV.25.a) et b) montrent les courbes de comportement en traction biaxiée et en cisaillement.

Pour la traction biaxiée, le modèle en β ne permet pas de rendre compte parfaitement de l'écart entre les contraintes selon les directions principales, bien que la moyenne des deux contraintes soit très bien décrite. Tout comme pour les contractions latérales en traction, il semble que le modèle en β identifié atténue les différences de comportement axiales dues à l'anisotropie plastique aussi bien pour la ferrite que pour la bainite. L'écart peut atteindre jusqu'à 50 MPa entre la moyenne par phase EF et le modèle en β , ce qui est toutefois raisonnable. Le niveau de contrainte dans la troisième direction reste bien nul pour les deux modélisations EF et β . Le comportement trouvé en traction biaxiée est donc relativement satisfaisant.

Pour le comportement en cisaillement, on observe une bonne représentation des niveaux de contrainte au sein de la phase ferritique, mais une sous-estimation significative du niveau de contrainte macroscopique. Assez logiquement puisque la tendance est bonne pour la ferrite, c'est au niveau du chargement en contrainte des amas que l'on trouve l'explication : pour le modèle en β , les amas voient leur contrainte de cisaillement augmenter beaucoup plus que pour les simulations EF à déformation macroscopique équivalente. Fort heureusement, les travaux de modélisation de la rupture porteront sur un critère en contrainte appliqué à la phase ferritique : cette mauvaise prédiction du comportement en cisaillement des amas n'a donc pas un caractère trop inquiétant.

Activation des systèmes de glissement en traction biaxiée et en cisaillement : Les courbes présentées aux figures IV.24.c) et d), et IV.25.c) et d) permettent de confirmer les bons résultats en termes de glissement obtenus sur le calcul identifié en traction uniaxiale : pour les chargements de cisaillement et de traction biaxiée, et malgré l'activation des systèmes secondaires, le glissement sur les systèmes principaux est bien reproduit par le modèle en β .

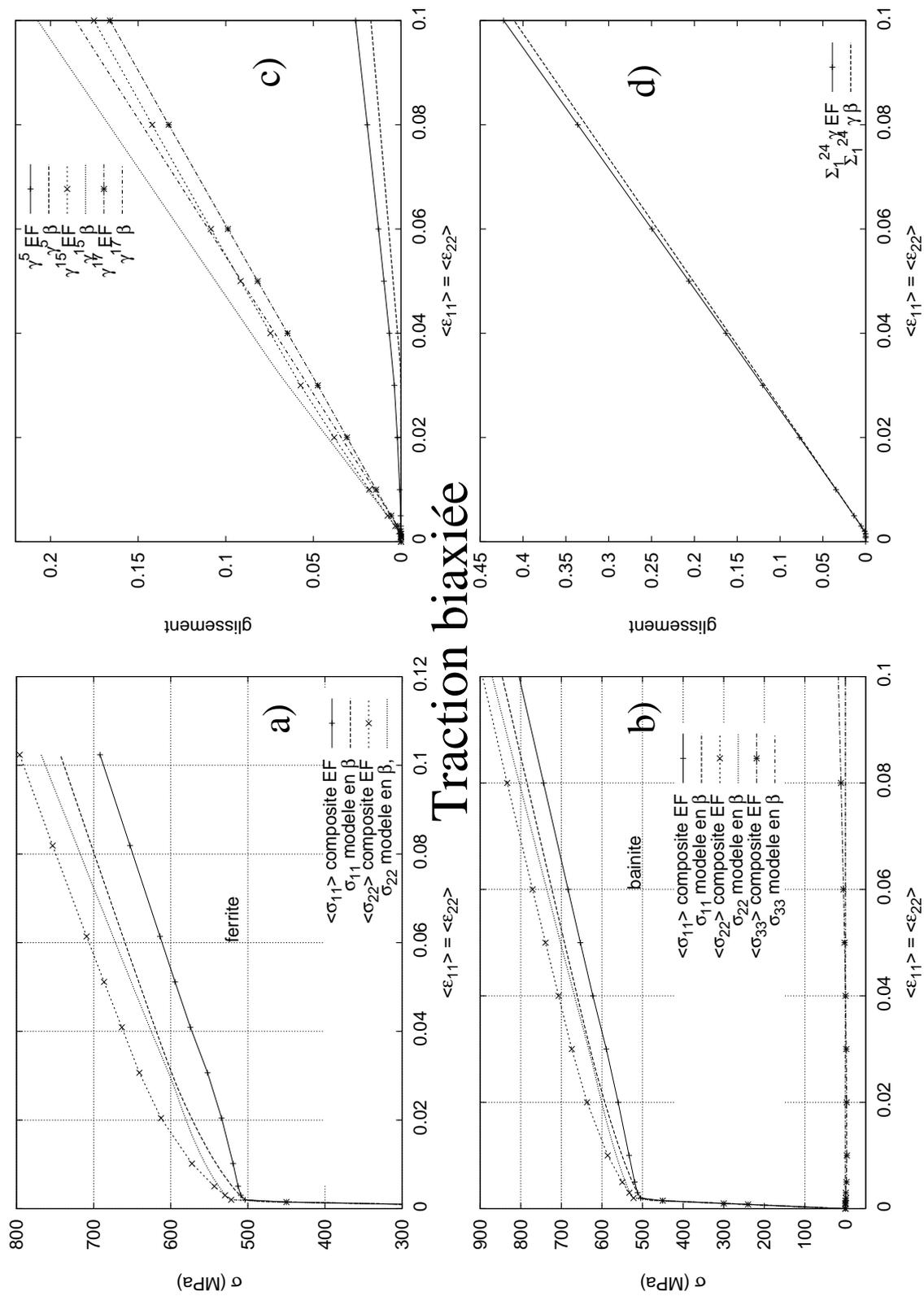


FIG. IV.24 – Comparaison entre le modèle en β et le calcul EF en traction biaxée. Courbes du comportement ($T=-150^\circ\text{C}$) de : a) la bainite et, b) la phase ferritique. Comparaison des intensités de glissement cumulé : c) sur les systèmes principaux activés, d) somme des glissements cumulés sur les 24 systèmes.

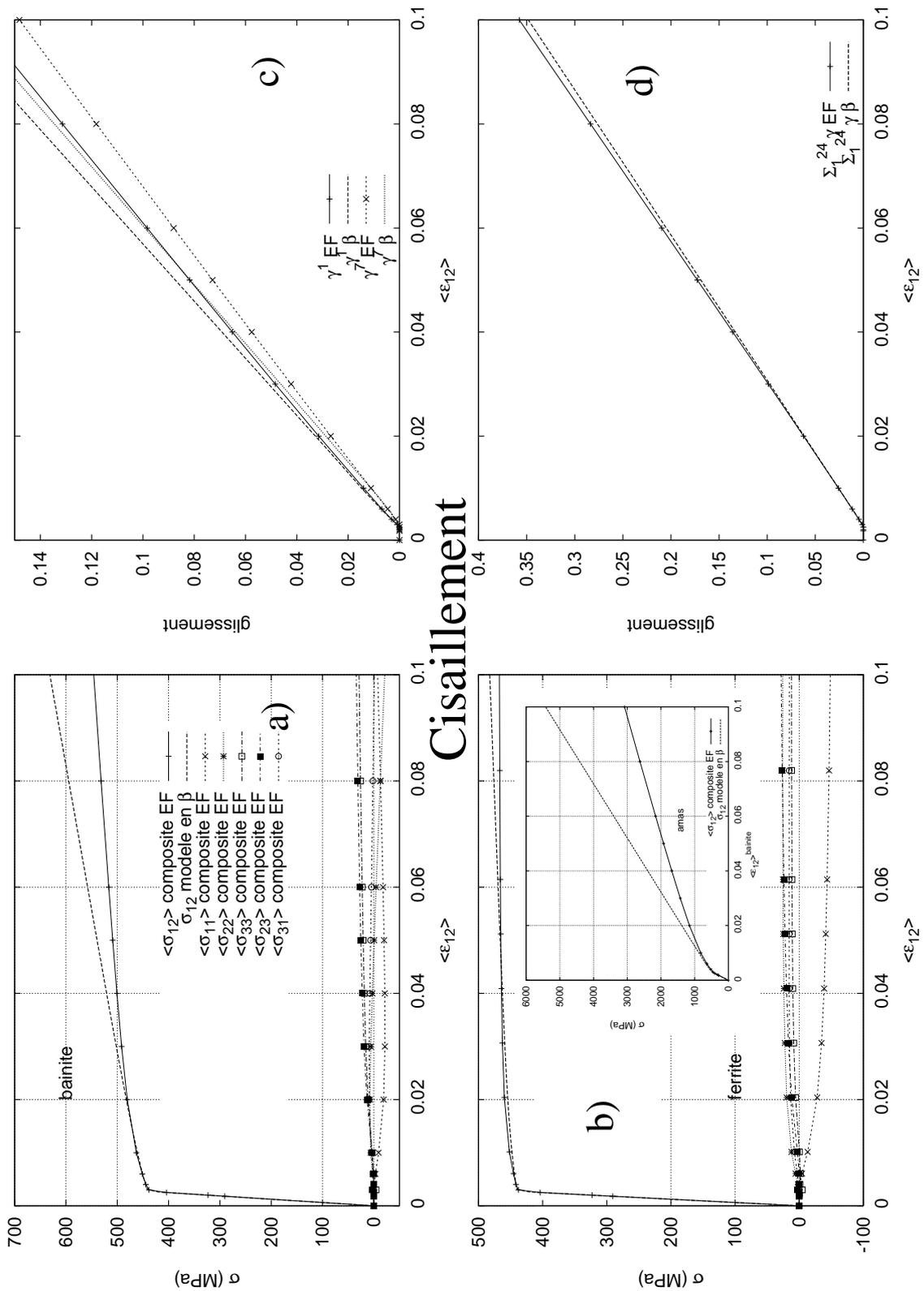


FIG. IV.25 – Comparaison entre le modèle en β et le calcul EF pour le cisaillement : a) Courbes du comportement en cisaillement ($T=-150^\circ\text{C}$) de la bainite , b) comportement de la ferrite et des amas (la déformation macroscopique est considérée dans ce dernier cas à titre de comparaison). Glissements : c) sur les systèmes principaux activés. d) somme des glissements cumulés sur les 24 systèmes.

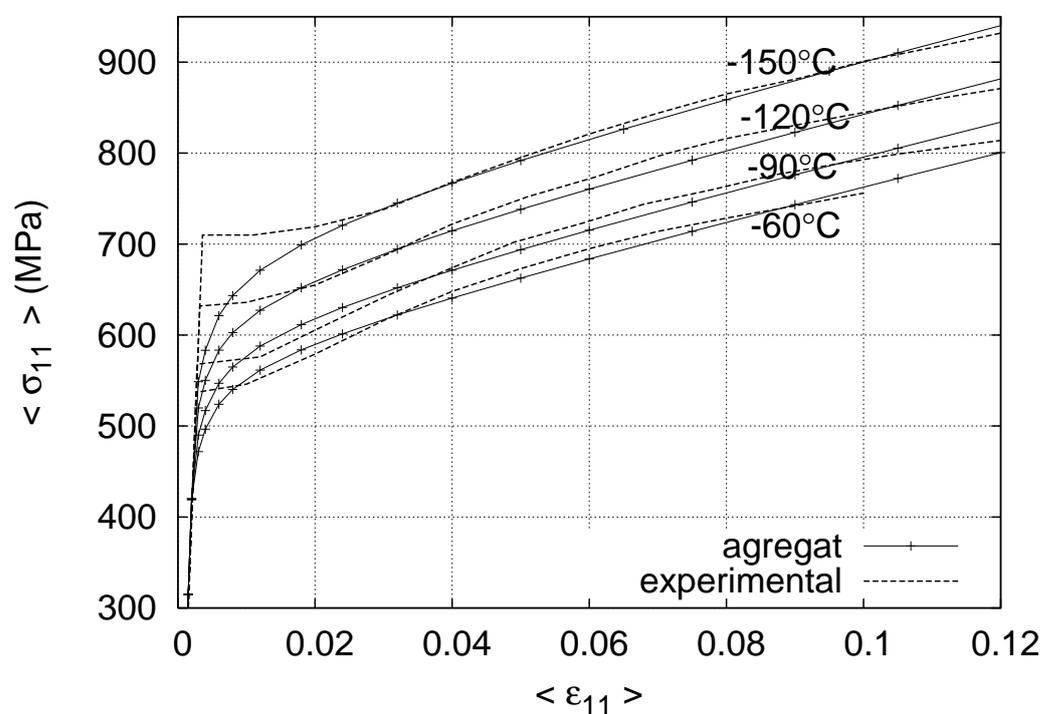


FIG. IV.26 – Courbes du comportement macroscopique en traction uniaxiale : résultats expérimentaux (d'après [Renevey, 1998].), et résultats des simulations aux différentes températures d'identification (paramètres utilisés : cf. tableau IV.3).

IV.4.2 Modélisation à l'échelle de l'agrégat

a) Reproduction du comportement de la bainite

Résultats de l'identification : L'identification a donc été conduite en ajustant les paramètres du comportement de la ferrite pour arriver au jeu de paramètres du tableau IV.3. On présente à la figure IV.26 les résultats de cette identification en termes de comportement macroscopique en traction uniaxiale à différentes basses températures. Les résultats expérimentaux en comportement utilisés sont ceux de [Renevey, 1998], qui a travaillé sur la même nuance d'acier 16MND5. En effet, la plupart des résultats en comportement obtenus durant les travaux présentés dans ce manuscrit concernent des éprouvettes non normalisées et de petites tailles. L'identification sur ces essais normalisés apparaît donc plus raisonnable.

L'observation de la figure IV.26 permet de faire plusieurs remarques. La première concerne le palier visible sur les essais expérimentaux pour le début de la déformation plastique. Ce type de palier, déjà évoqué et dû aux instabilités de déformation plastique en début de plasticité, ne peut être simplement reproduit dans le cadre de la modélisation envisagée. Il a donc classiquement été choisi de ne pas en tenir compte et de mener l'identification sur la partie des courbes de comportement située au-delà de 3% de déformation macroscopique.

On note ensuite que l'on ne parvient pas à reproduire exactement l'allure des courbes macroscopiques, et notamment l'érouissage, malgré l'utilisation d'une loi d'érouissage exponentielle permettant la saturation. Cela peut en partie s'expliquer par le fait que la loi de comportement de la ferrite comporte 24 systèmes de glissement, mais qu'on n'a pas introduit une cission critique différente entre les deux familles de systèmes de glissement. Cela aurait permis de provoquer un second "adoucissement" du comportement, au déclenchement des systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{112\}$. Dans le même ordre d'idée, pour une modélisation macroscopique du comportement, on constate par exemple que Tanguy [Tanguy, 2001] introduit deux composantes d'érouissage isotrope pour bien décrire le comportement sur une large plage de déformation. Si cela se justifiait certainement dans ses travaux mettant en oeuvre de très fortes déformations (approche locale de la rupture sur éprouvettes Charpy), on n'a pas voulu alourdir la représentation pour ces travaux qui ne s'intéressent pas, *a priori*, aux fortes déformations.

Malgré cette observation, on considère que le comportement macroscopique s'approche d'une manière très satisfaisante des résultats expérimentaux surtout si l'on considère la prise en compte de multiples échelles (agrégat, biphasé, systèmes de glissement), où les comportements introduits sont d'expression relativement simple. Ainsi, seuls 3 paramètres ont été réellement ajustés à chaque température pour identifier le comportement macroscopique. La démarche complète de modélisation peut être qualifiée de complexe du fait des multiples échelles de représentation, mais elle tente volontairement de s'affranchir d'un enrichissement superflu des représentations locales.

Effets de surface : Les observations à venir concernent les remarques générales à tirer de la modélisation en traction utilisée pour le comportement. Elles concernent la modélisation à -150°C mais sont quasiment transposables en l'état aux différentes températures d'identification. Les remarques concernant l'influence de la température sur les répartitions des champs mécaniques seront abordées au chapitre suivant pour des chargements caractéristiques, à même de provoquer le clivage (fortes triaxialités). Comme pour la visualisation des champs mécaniques concernant le biphasé, il a été choisi de représenter les cartographies des résultats sur une partie du maillage permettant de visualiser à la fois l'allure des champs à la surface et à l'intérieur du volume. On a représenté cette partie du maillage à la figure IV.27.e).

On constate globalement que les effets de surface dus aux CAL sur le maillage ne sont pas aussi forts que pour les calculs EF du biphasé ferrite-amas, ce qui est certainement dû aux types de CAL différents utilisés (imposer la déformation complète au contour du biphasé est plus contraignant que d'imposer seulement un des déplacements sur la surface de l'agrégat), mais aussi, au fait que les comportements des différentes phases (orientations pour la bainite) sont moins hétérogènes ici que dans le cas du biphasé où les amas étaient considérés comme élastiques, et donc beaucoup plus durs que la ferrite.

Les observations en surface et à coeur ne montrent pas d'effet de surface vraiment significatif.

Répartitions intragranulaires des champs mécaniques dans la microstructure bainitique : La figure IV.27 permet d'observer les champs mécaniques en surface et à l'intérieur de l'agrégat (hétérogénéités à l'ordre III).

On constate que localement, les hétérogénéités de contraintes se développent (en termes d'étendue de distribution) avant les hétérogénéités de déformation. Cela sera confirmé et quantifié au chapitre suivant. On observe par contre que ces hétérogénéités apparaissent très tôt : les zones de l'agrégat les plus chargées ou déformées restent les mêmes entre le début du chargement et par la suite.

L'allure des champs de déformation totale (figure IV.27.c et d) montre l'apparition de zones de déformation localisées, avec des structures dont les intersections avec les plans de visualisation forment des bandes à $\pm 45^{\circ}$ de la direction de traction, ce que l'on rapproche des structures de déformation observées lors d'essais de traction macroscopique ou in-situ. Par contre, l'allure du champ de déformation totale ne rappelle pas *a priori* ce qui est observé localement, notamment aux joints de grains lors d'essais in-situ.

La répartition du champ de contrainte de von Mises (figure IV.27.a et b) montre bien, par contre, cet aspect important qui ne peut être aussi facilement pris en compte dans le calcul par MCM que par le calcul sur agrégats : on constate bien que le chargement est rapidement localisé aux joints de grains. On peut dès lors mettre cette observation en parallèle avec la figure IV.28, qui présente notamment le glissement total cumulé dans la ferrite. On observe cette fois-ci une localisation du glissement plastique

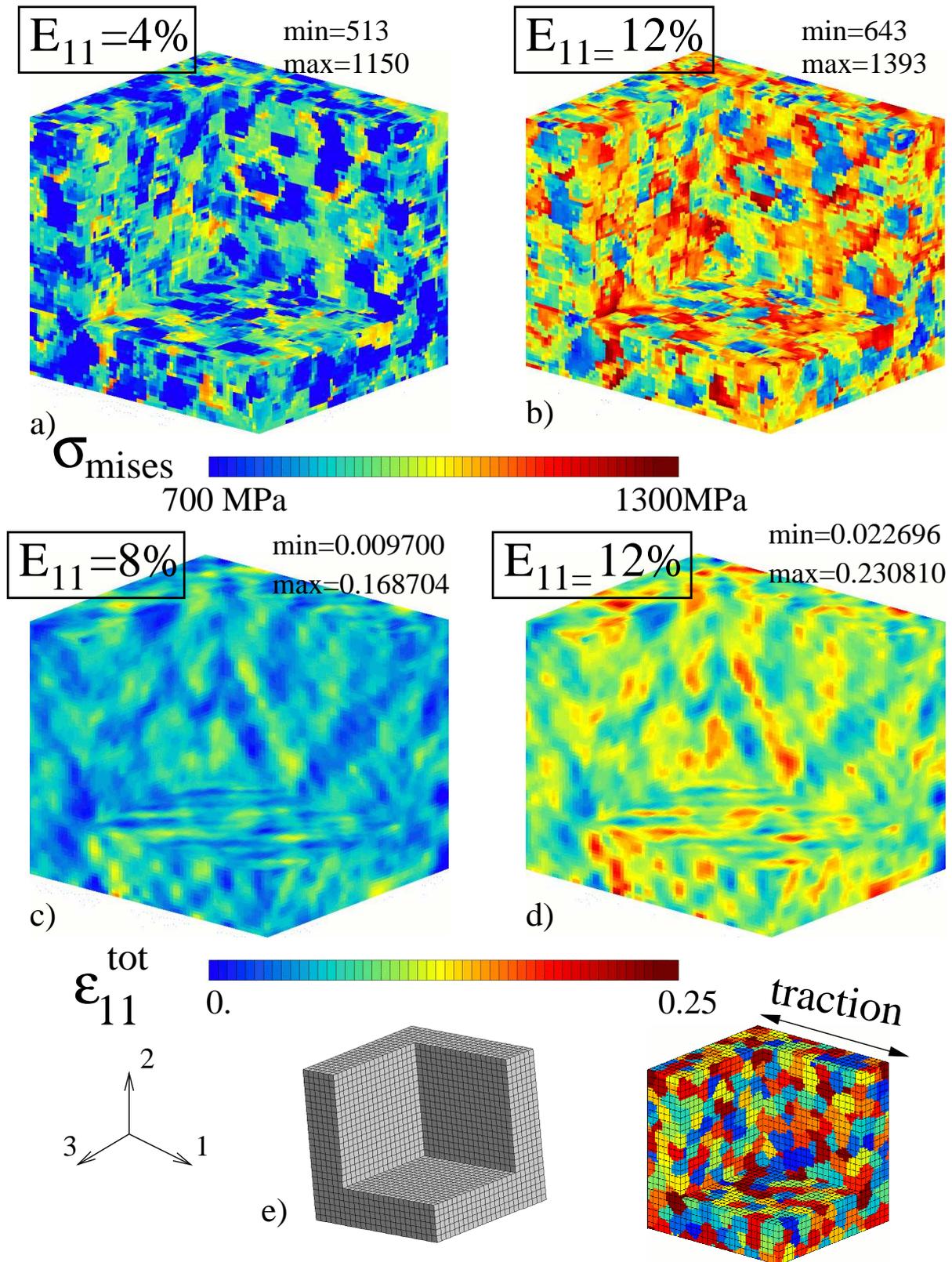


FIG. IV.27 – Champs mécaniques dans la bainite pour différents niveaux de déformation, en surface et à l'intérieur de l'agrégat. a),b) Champs de contrainte équivalente de von Mises. c),d) Déformation dans la direction de traction. e) illustration de la partie de maillage utilisée pour les visualisations des champs mécaniques. $T = -150^\circ\text{C}$

au niveau des joints de grains caractéristique, et qualitativement similaire à ce que l'on observe, par exemple à la figure III.6 du chapitre précédent. On explique simplement cette localisation : le glissement plastique supplémentaire aux joints permet d'accommoder les incompatibilités de déformation plastique entre grains, qui résultent elles-mêmes de la déformation macroscopique.

Lors des observations expérimentales de surface, on n'observe que le glissement plastique (en effet, on ne peut visualiser à l'échelle d'un MEB les déformations élastiques...), et qu'au final c'est bien les figures IV.28 et III.6 que l'on doit rapprocher de manière qualitative, ce qui est ici tout à fait raisonnable.

La figure IV.28 illustre que le glissement sur les systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{112\}$ est en général plus fort que celui des systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{110\}$ (l'observation sur ces deux systèmes peut être généralisée à tous les autres). Cela démontre que malgré l'emploi d'un écrouissage plus fort sur les systèmes $\langle 111 \rangle \{112\}$, on ne parvient pas à privilégier le glissement sur les systèmes $\langle 111 \rangle \{110\}$. Cela nécessiterait d'employer des cisssions critiques différentes, ce qui n'a pas été fait dans ces travaux, mais aussi un écrouissage beaucoup plus fort sur la famille $\langle 111 \rangle \{112\}$.

On évoquera par ailleurs que comme c'était déjà le cas pour le calcul du biphasé EF, le nombre de systèmes de glissements activés de manière significative au sein d'un même grain est de manière générale beaucoup plus élevé dans le cadre du calcul sur agrégat que pour les MCM : les effets de voisinage entre grains entraînent un chargement très hétérogène au sein du grain. Cela entraîne l'activation de nombreux systèmes de glissement. On constate néanmoins que les principaux et premiers systèmes activés sont ceux ayant le plus fort facteur de Schmid (ce qui n'est pas illustré ici.).

b) Effet composite : répartition des champs entre ferrite et bainite

Répartition en moyenne par phase : La figure IV.29 présente la répartition des contraintes en moyenne par phase en cours de traction sur l'agrégat. La différence de contrainte entre la bainite et la ferrite recherchée par l'utilisation du modèle en β est macroscopiquement bien reproduite (de l'ordre de 150 MPa pour 10% de déformation). Néanmoins, comparativement aux résultats expérimentaux, cette différence est sous-estimée pour la simulation aux faibles niveaux de déformation (jusqu'à 10% de déformation). Cet aspect confère à la simulation un caractère relativement "conservatif" par rapport aux mesures expérimentales : la ferrite est plus chargée pour le calcul que pour les résultats expérimentaux.

Répartition intragranulaire par phase : Par ailleurs, la figure IV.30 permet d'observer les champs mécaniques en surface et à l'intérieur de l'agrégat pour chacune des phases introduites au moyen du modèle en β au niveau de chaque point d'intégration. La représentation de la contrainte équivalente de von Mises au sein de la phase ferritique avec la même échelle qu'à la figure IV.27.b confirme les aspects évoqués ci-avant. L'allure de la

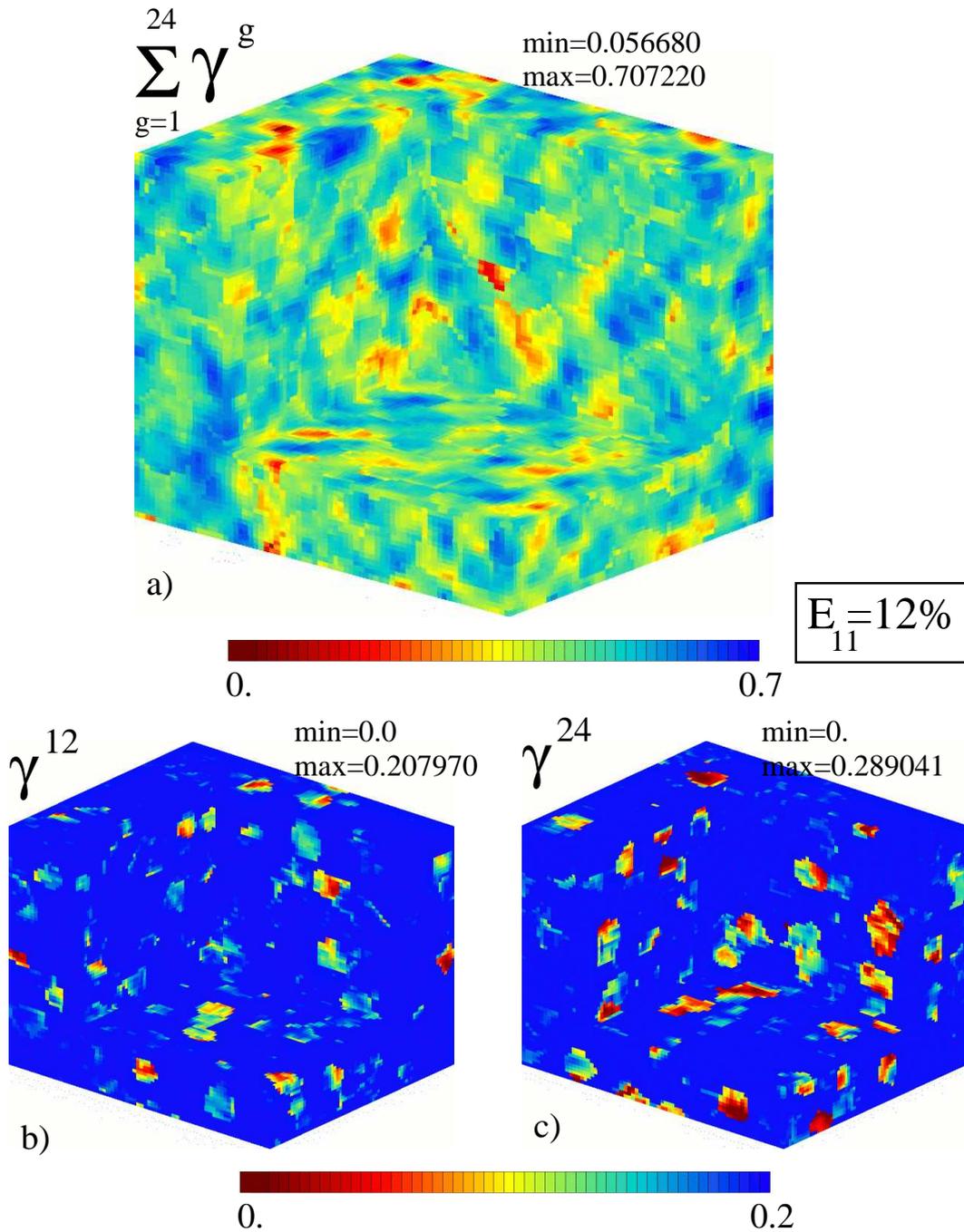


FIG. IV.28 – Glissement total cumulé dans la ferrite en surface et à l'intérieur de l'agrégat, et glissement cumulé sur les systèmes 12 (famille $\langle 111 \rangle \{110\}$) et 24 (famille $\langle 111 \rangle \{112\}$) de l'agrégat. $T = -150^\circ\text{C}$

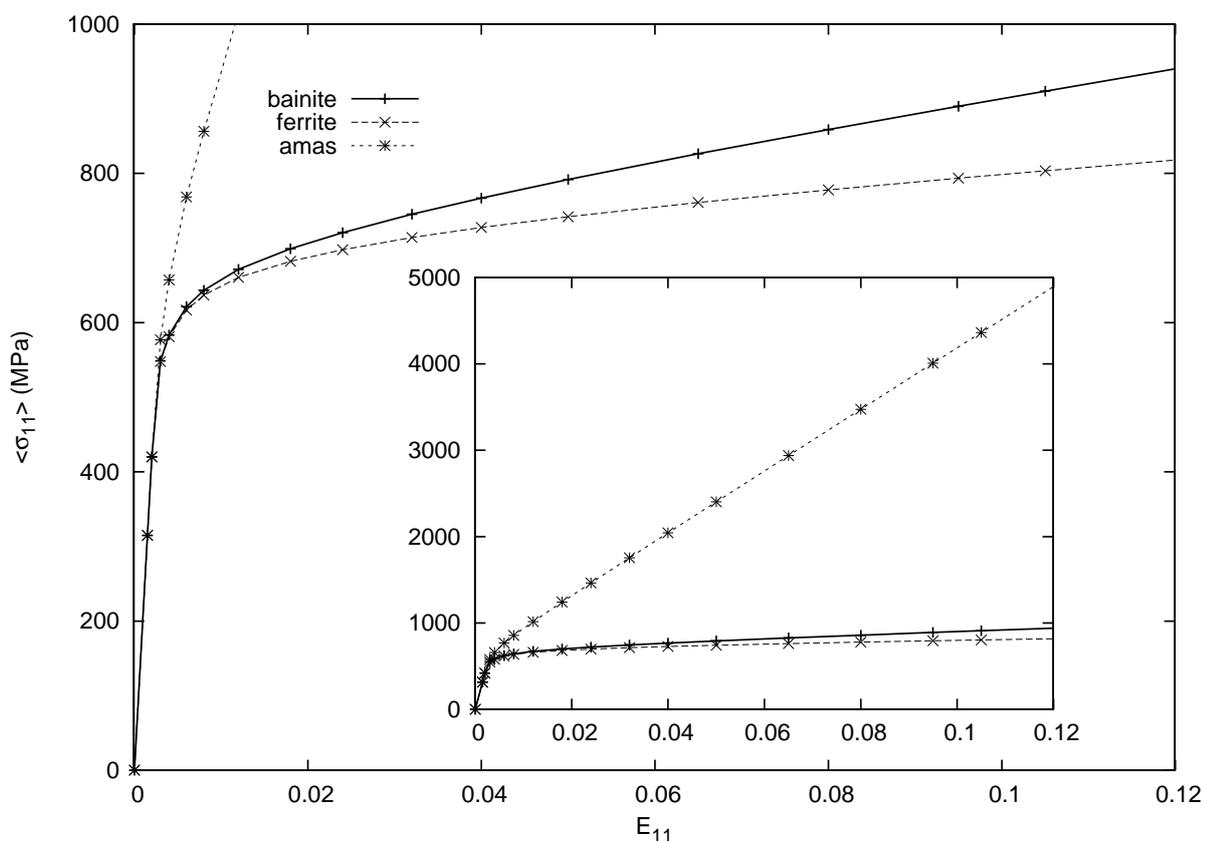


FIG. IV.29 – Hétérogénéités pseudo-macroscopiques (ordre I). Répartition des contraintes moyennes par phase à -150°C .

répartition des contraintes dans la ferrite pour 12% de déformation ressemble alors à celle de la répartition des contraintes dans la bainite pour 4% de déformation, à la fois en termes de répartition au sein de l'agrégat et en termes de valeurs.

La répartition des déformations pour 12% de déformation macroscopique est représentée à la figure IV.30.c et IV.30.d. La comparaison de la première figure avec la figure IV.27.d montre que la ferrite est toujours un peu plus déformée que la bainite, alors que les amas ne se déforment que très peu. La répartition de la déformation par phase possède la même allure que ce soit pour la ferrite ou pour les amas : les zones les plus déformées dans l'agrégat sont les mêmes pour les deux phases. L'échelle de représentation a été changée pour représenter la contrainte équivalente de von Mises dans les amas, puisque les valeurs atteintes sont très élevées. Une comparaison de la figure IV.30.b avec la figure IV.30.c, c'est la déformation de la ferrite (qui est quasiment équivalente à la déformation plastique pour les forts niveaux de déformation), qui contrôle à chaque point d'intégration la montée en contrainte des amas.

L'observation de la microstructure a montré que les échelles du biphasé "amas/ferrite" et de la microstructure en grain sont très proches, ce qui n'est pas respecté dans le cadre de la représentation choisie. On a séparé, en les hiérarchisant dans la représentation, des échelles spatiales de représentations (effet "composite" puis "polycristal") qui sont relativement proches. Une solution plus élégante eût été d'introduire les amas directement au sein de chaque grain en les représentant dans le maillage du paquet bainitique. Elle n'a pu être mise en oeuvre ou même envisagée car elle aurait nécessité de discrétiser beaucoup plus la représentation (un amas aurait alors dû comporter au moins autant de points d'intégration qu'un grain de la représentation actuelle). Ce qui n'aurait pas permis l'étude d'un volume représentatif suffisant.

On peut enfin aussi remettre en cause la simplification qui a été faite d'attribuer un comportement élastique aux amas, ce qui tend à élever très fortement leur état de contrainte pour de fortes déformations macroscopiques. Les fortes valeurs en contrainte atteintes localement pour le niveau de déformation $E_{11} = 12\%$ ne sont certainement pas représentatives de la réalité, et l'on touche ici à une des limitations de la représentation choisie.

Toutefois, on sait que les chargements triaxiés qui seront étudiés au chapitre suivant n'amèneront pas à considérer de forts niveaux de déformation plastique ($< 4\%$), limitant d'emblée le problème. De plus, le critère considéré pour la rupture concerne principalement l'état mécanique de la phase ferritique, ce qui rend la représentation valide.

c) Effet polycristal : répartitions en moyenne par grain

Comportement moyen par grain : La figure IV.31.a) présente les courbes de comportement moyen de chacun des 1000 grains. La réponse macroscopique selon la direction de traction est représentée à titre de comparaison à la figure IV.31.c).

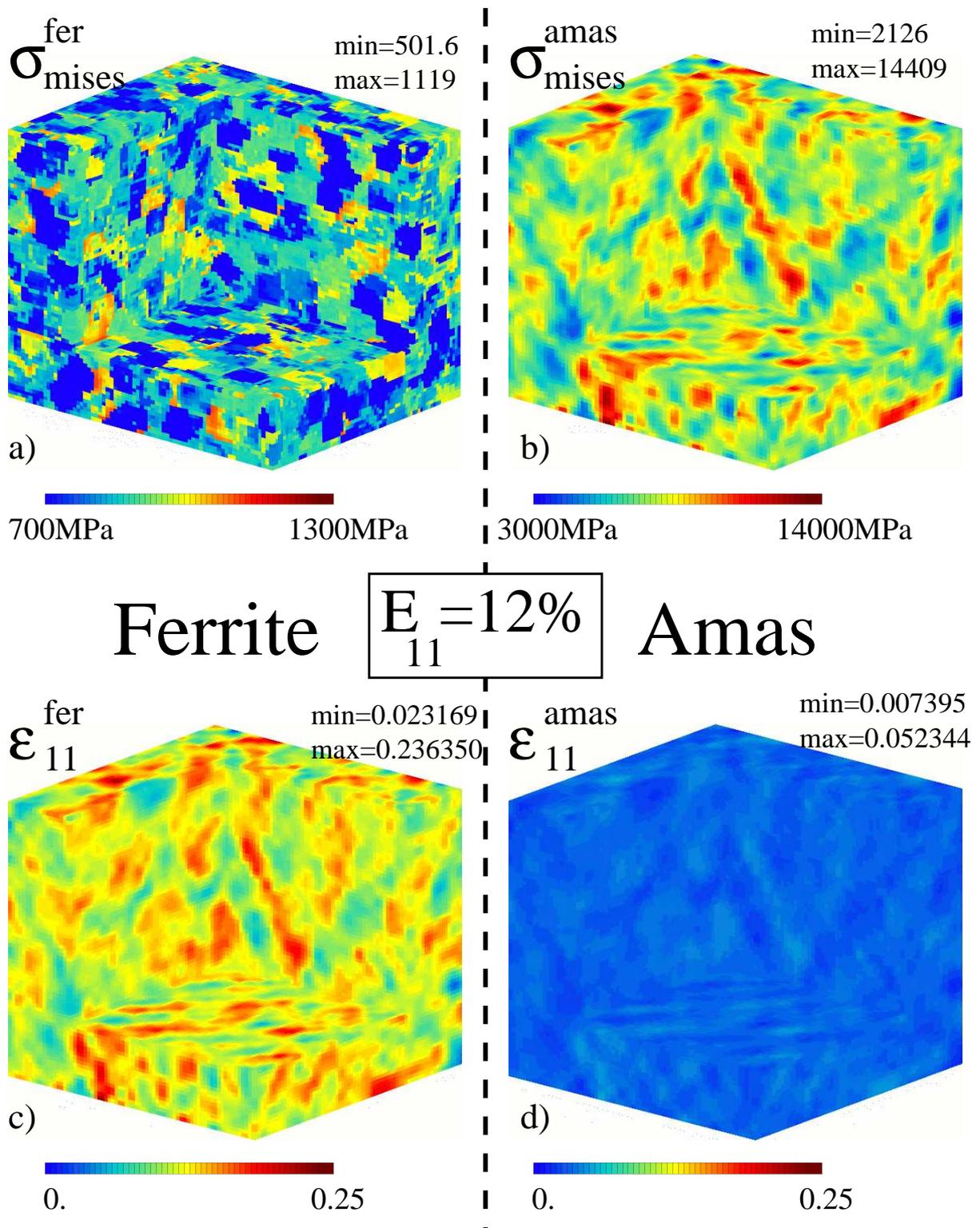


FIG. IV.30 – Champs mécaniques dans la phase ferritique et dans les amas, en surface et à l'intérieur de l'agrégat. $T = -150^\circ\text{C}$

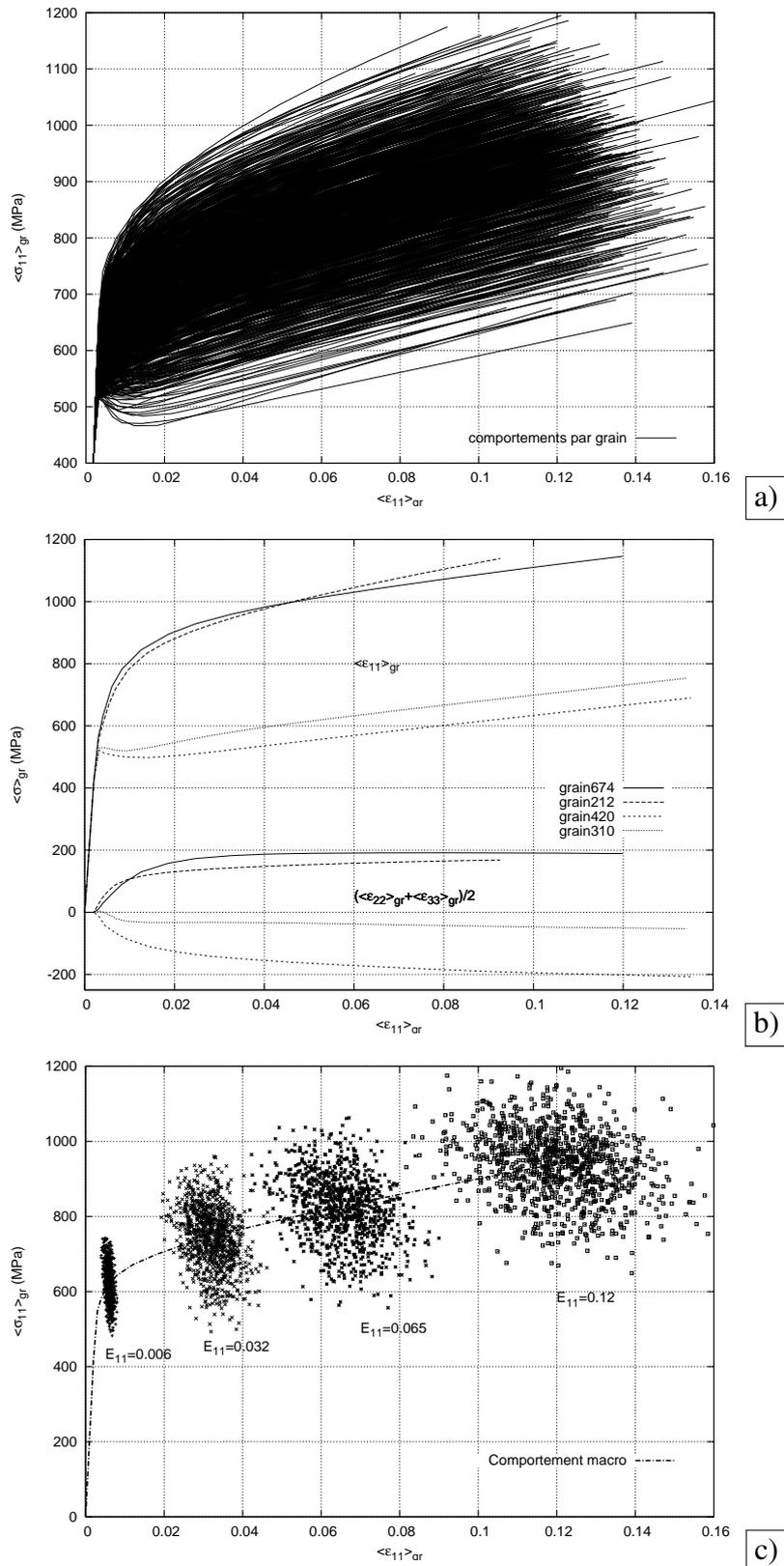


FIG. IV.31 – Hétérogénéités intergranulaires à -150°C : a) Les différentes trajectoires de comportement empruntées en moyenne par chaque grain en cours de traction. b) Illustration de la "décharge" apparente de certains grains. c) Observations des répartitions d'états mécaniques moyens par grain dans la bainite pour différents niveaux de déformation.

Le faisceau de courbes présenté en IV.31.a) est caractéristique de ce qui a déjà été observé en plasticité cristalline sur agrégats pour d'autres matériaux [Barbe et al., 2001b, Diard et al., 2005]. On note toutefois qu'en raison du niveau de contrainte macroscopique atteint, élevé par rapport aux travaux évoqués, les différences entre le grain le plus chargé et le grain le moins chargé sont beaucoup plus fortes pour la bainite que pour les autres matériaux déjà étudiés.

On note quelques grains au "comportement" relativement inhabituel sur cette figure : ils semblent se "décharger" puis, se charger à nouveau. Plusieurs tentatives ont été menées afin de corrélérer cette "décharge" apparente avec différents paramètres tels que le nombre de systèmes activés ou la déformation équivalente, sans succès.

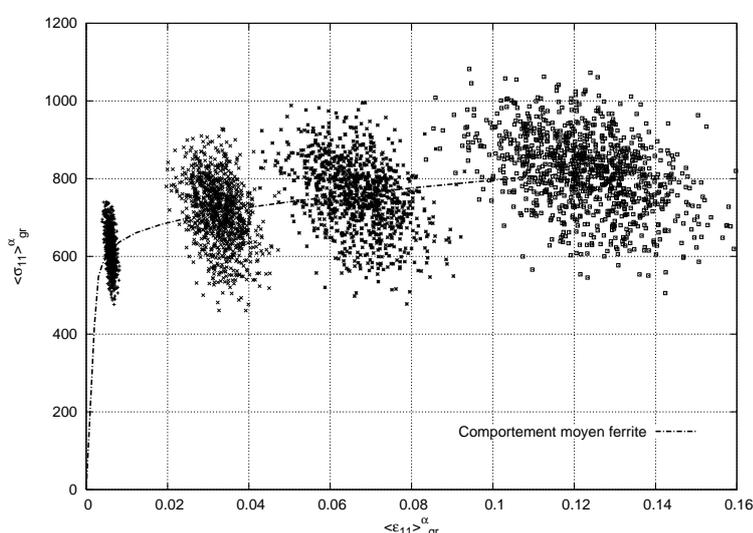


FIG. IV.32 – Hétérogénéités granulaires dans la ferrite à -150°C : représentation des répartitions de champs mécaniques dans la ferrite en moyenne par grain pour différents niveaux de déformation macroscopique, à rapprocher de la figure IV.31.c).

L'explication s'avère être beaucoup plus triviale, et est illustrée à la figure IV.31.b). Cette décharge dans l'axe de traction de certains grains s'explique en fait par une forte compression dans les directions transverses en début de déformation macroscopique : on peut facilement imaginer que les grains adjacents, en plastifiant beaucoup moins, exercent cette compression, qui entraîne une baisse de la contrainte dans la direction de traction pour équilibrer la pression. Cela montre un des gros intérêts du calcul sur agrégat, qui permet de capter des effets de voisinage non seulement sur les hétérogénéités intragranulaires, mais aussi sur les contraintes moyennes dans les grains, qu'il n'est pas envisageable de capter avec les MCM. Par ailleurs, ces observations montrent que ces effets ne sont pas du tout négligeables par rapport à l'effet de l'orientation de la matrice ferritique, qui est le seul pris en compte dans les MCM.

Les hétérogénéités de contraintes par rapport au comportement moyen de l'agrégat se développent plus tôt que les hétérogénéités de déformation (figure IV.31.c). On observe de très forts gradients de contrainte moyenne par grain dès qu'on a franchi la limite d'élasticité macroscopique.

La figure IV.32 montre que globalement, la différence de chargement entre ferrite et bainite est aussi valable pour l'état mécanique moyen par grain : l'allure de la répartition de la moyenne de contrainte par grain dans la ferrite est la même que pour la bainite, avec des niveaux de contraintes plus bas de 100 MPa pour 10% de déformation.

IV.4.3 Comparaison avec la DRX, validation de la représentation de l'effet "polycristal"

Les simulations à différentes températures donnent un comportement macroscopique satisfaisant. On a évoqué au chapitre précédent une technique donnant une "image" des hétérogénéités de contrainte à la surface d'un échantillon de traction après décharge, la méthode des $\sin^2\psi$.

Afin de valider la démarche de modélisation à une échelle inférieure, on peut comparer les hétérogénéités de contrainte en décharge prévues par le modèle à celles effectivement déterminées par les expérimentations en diffraction des rayons X.

a) Simulations effectuées

Des simulations ont donc été menées dans ce cadre. Le maillage à 1000 grains, déjà utilisé pour les identifications a donc à nouveau été mis en oeuvre avec un jeu de conditions aux limites différentes. Partant du constat que les mesures de diffraction effectuées se font en surface des échantillons (pénétration des rayons X de l'ordre de la taille de grain), des conditions aux limites mixtes ont été choisies (cf. annexe A-III.2). Ainsi, les deux surfaces normales à la direction 3 sont laissées libres. Les autres faces auront des CAL de DHC, afin de garder un comportement relativement rigide. La réponse en traction obtenue avec les deux faces libres est identique (à 30 MPa près pour 12% de déformation) à celle de l'agrégat qui a servi à l'identification. Les simulations sont faites avec la loi de comportement à -150°C.

La figure IV.33.a) montre les contraintes dans la direction 3 au niveau d'une des surfaces libres. L'hypothèse faite dans la méthode des $\sin^2\psi$ selon laquelle $\sigma_{33} = 0$ est relativement correcte.

Par ailleurs, la figure IV.33.b) montre la déformée amplifiée 5 fois : on constate l'apparition d'un relief de surface important au niveau des surfaces libres.

b) Post-traitement spécifique

Afin de traiter le calcul pour obtenir les oscillations, on commence par moyenner le tenseur des déformations élastiques dans la phase ferritique sur chaque grain, (qui possède ici une orientation de réseau cristallin uniforme) :

$$\langle \underline{\xi}_g^e \rangle = \frac{1}{V_g} \int_{V_g} \underline{\xi}_{fer}^e \quad (4.41)$$

où V_g représente le volume du grain considéré. Cette déformation moyenne est ensuite projetée sur les normales de chacun des 12 plans $\{112\}$ de la matrice ferritique (qui dépendent de l'orientation) :

$$e_p^g = \underline{n}_p^g \cdot \langle \underline{\xi}_g^e \rangle \cdot \underline{n}_p^g \quad (4.42)$$

Chaque doublet d'angles $(\phi; \psi)$ utilisé lors de la méthode des $\sin^2\psi$ correspond à une direction \underline{N} de diffraction idéale, représentant la normale d'un plan en position de diffraction idéale (figure A-II.5). On obtient ω_p^g , l'angle entre \underline{n}_p^g et \underline{N} par :

$$\omega_p^g = \min(\cos^{-1}(\underline{n}_p^g \cdot \underline{N}), \pi - \cos^{-1}(\underline{n}_p^g \cdot \underline{N})) \quad (4.43)$$

Lors d'une détermination de position de pic diffraction et du fait des conditions expérimentales, les plans cristallins diffractants ne sont pas tous orientés dans la direction idéale \underline{N} . Afin de donner un poids plus grand dans la valeur déterminée pour $\varepsilon_{\phi\psi}$ aux plans bien orientés par rapport aux plans légèrement désorientés, un facteur a_p^g de formulation gaussienne est utilisé pour le calcul de la déformation moyenne selon :

$$a_p^g = \exp\left(-.5\left(\frac{\omega_p^g}{\Omega}\right)^2\right) \quad (4.44)$$

où Ω représente l'écart type du facteur. La formulation gaussienne a été choisie en fonction de la forme gaussienne des pics de diffraction observés pour l'acier 16MND5. L'utilisation d'une valeur de 2° pour Ω permet d'obtenir une influence pondérée pour les déformations des plans de diffraction légèrement désorientés, comme illustré à la figure IV.34, mais aussi d'éliminer simplement les plans non diffractants.

On calcule ensuite $\varepsilon_{\phi\psi}$ comme étant la moyenne des déformations élastiques sur les plans pondérée par le coefficient a_p^g :

$$\varepsilon_{\phi\psi} = \left(\frac{1}{\sum_g \sum_p a_p^g}\right) \sum_g \sum_p a_p^g e_p^g \quad (4.45)$$

La profondeur de pénétration des rayons X est de l'ordre de la dizaine de microns (soit une couche de grain). Typiquement, la surface du faisceau incident couvre environ $2 \times 2 \text{ mm}^2$. Ainsi, en considérant une taille de paquets de lattes d'environ $15 \mu\text{m}$, on obtient qu'environ 17000 grains peuvent participer à la diffraction.

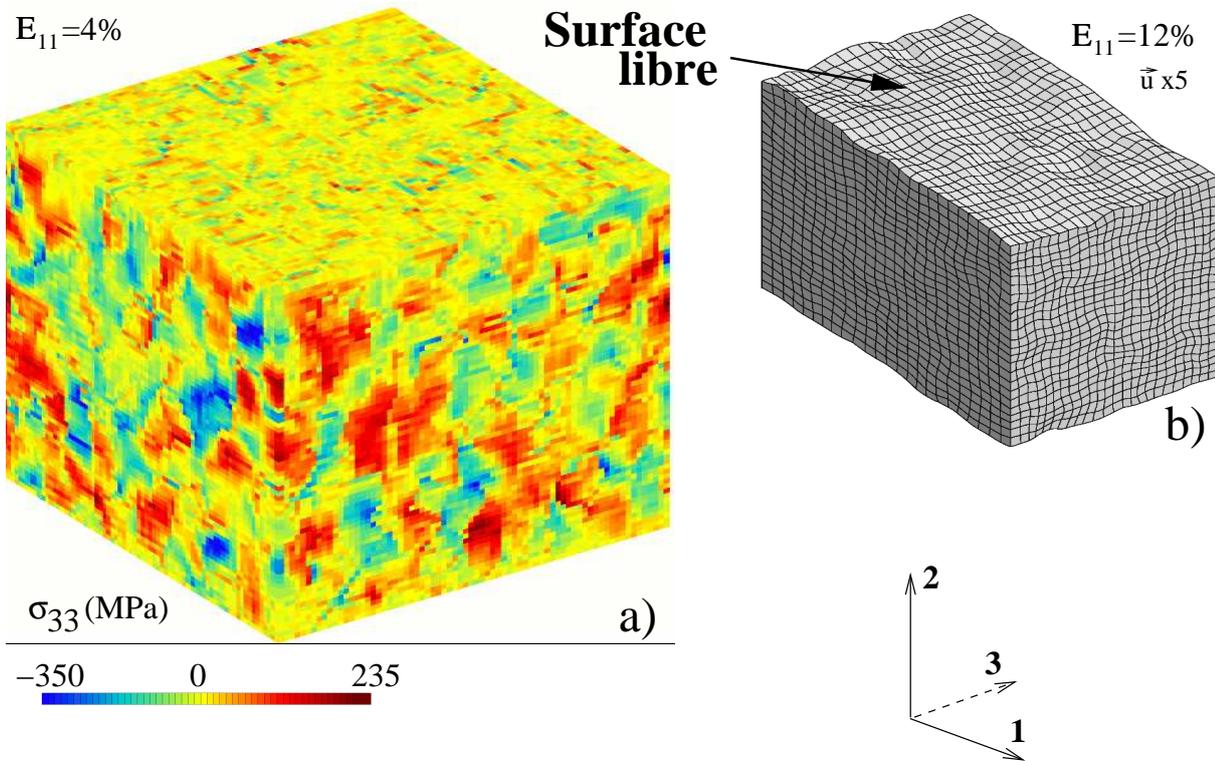


FIG. IV.33 – Un calcul de traction avec 2 surfaces libres utilisé pour simuler la courbe $\epsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$: a) contrainte dans la direction 3 en début de déformation, b) déformée amplifiée d'un facteur 5.

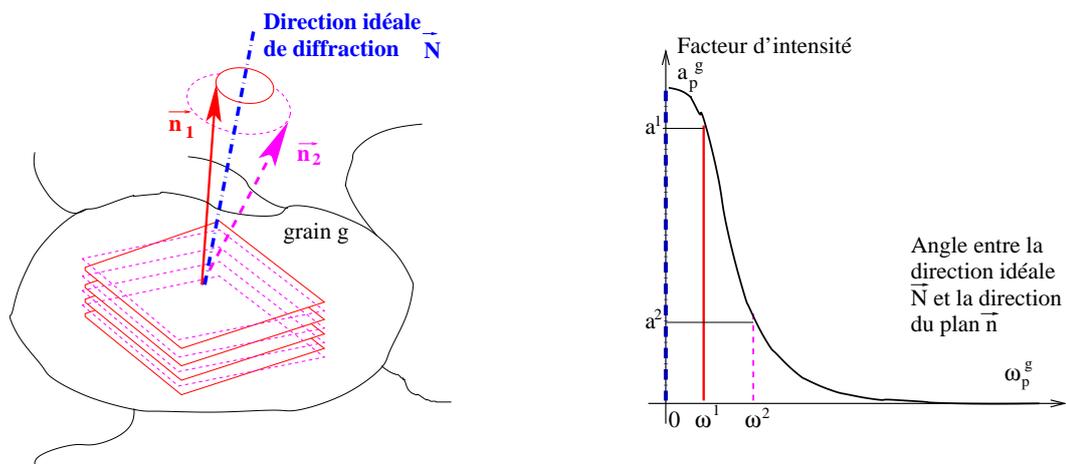


FIG. IV.34 – Principe de la pondération de la déformation élastique trouvée sur un plan en fonction de son orientation par rapport à la direction de diffraction idéale.

Il a été choisi, pour respecter les conditions de surface libre sur la zone irradiée en DRX, de ne tenir compte pour un agrégat que des deux couches de grains situées au niveau des surfaces libres, comme illustré à la figure IV.35, ce qui représente 200 grains. Afin d'augmenter le nombre de grains considérés et ne pouvant faire passer de plus grosses simulations, cinq simulations avec attribution d'orientations différentes ont été effectuées (la morphologie individuelle des grains restant inchangée) amenant ainsi le nombre de grains considérés à 1000.

c) Résultats

Un post-traitement reprenant les opérations décrites par les équations 4.41 à 4.45 a été développé et utilisé avec les résultats groupés des cinq calculs. Les résultats bruts de ce post-traitement sont visibles sur la figure IV.36. Les oscillations décrites par la simulation ne correspondent pas vraiment à celles déterminées expérimentalement, reprises du chapitre III.

On a donc utilisé l'algorithme des moindres carrés non-linéaires de Marquardt-Levenberg, directement implémenté dans le logiciel `Gnuplot` pour obtenir une approximation par un polynôme (ici de degré 5). L'allure obtenue est alors très proche des oscillations expérimentales. La pente globale des oscillations, qui représente la contrainte résiduelle dans la ferrite, est très bien reproduite. Par ailleurs, la bonne tendance des oscillations confirme une bonne représentation des hétérogénéités au sein de la phase ferritique.

Deux hypothèses peuvent être proposées quant à la difficulté de reproduire exactement les oscillations dans le cadre de ces travaux :

- Le fait que l'approximation donne une tendance tout à fait correcte peut faire penser que les oscillations "supplémentaires" autour de cette tendance, présentes au niveau des résultats bruts, sont dues à un nombre de grains considérés insuffisant : les oscillations présentées par Pesci [Pesci, 2004] sont obtenues sur des simulations de 5000 grains, à comparer aux 1000 grains simulés ici. On ajoute que, pour les calculs présentés ici, les effets de voisinage entre grains qui perturbent fortement les champs intra-granulaires augmentent encore le nombre de grains à considérer pour obtenir un volume "diffractant" représentatif suffisant.
- L'élasticité utilisée dans la formulation du comportement de la ferrite est isotrope. Bien que de nombreux travaux montrent une très faible influence de l'élasticité cubique sur les résultats en charge en termes de niveaux de contrainte une fois la plasticité mise en place, il est possible qu'elle ait un effet non négligeable lors de la décharge élastique. L'anisotropie de \mathbb{C} amène dans ce cas une amplification des hétérogénéités.

Étant donné les temps de calculs nécessaires pour confirmer l'une ou l'autre des hypothèses, on laissera cette question en suspens, en se contentant de la tendance correcte obtenue pour l'approximation polynomiale. Ce résultat est tout à fait satisfaisant si on le

compare aux tentatives précédentes de reproduire les oscillations en décharge de l'acier 16MND5 [Pesci, 2004].

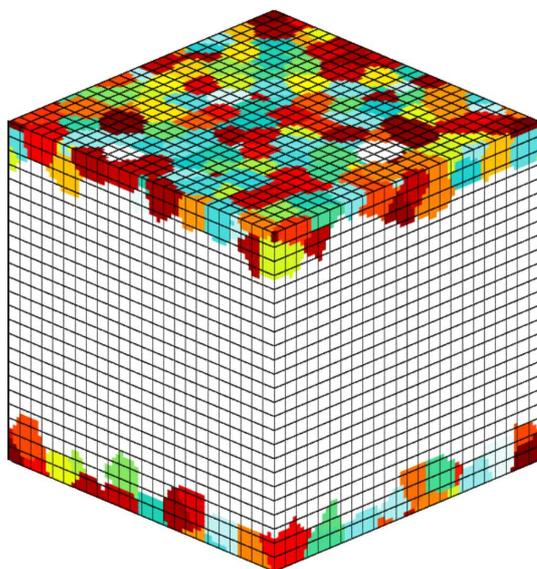


FIG. IV.35 – Grains des agrégats considérés pour le calcul des $\sin^2\psi$.

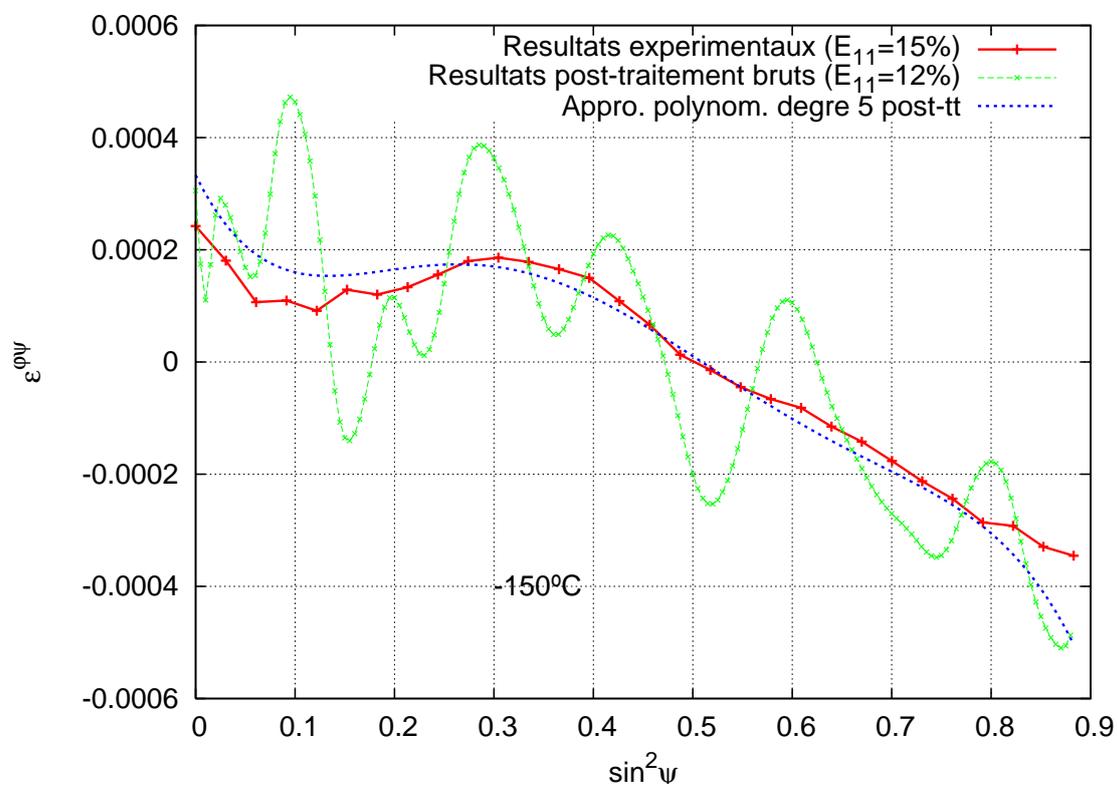


FIG. IV.36 – Comparaison des oscillations $\sin^2\psi$ expérimentales et simulées.

En conclusion

- Une approche multi-échelles faisant intervenir les deux niveaux d'hétérogénéités mécaniques dues à la microstructure observée au chapitre précédent est proposée. Elle permet de modéliser le comportement de l'acier depuis l'échelle des systèmes de glissement jusqu'au comportement macroscopique. L'effet composite est pris en compte grâce à un MCM, alors que le calcul d'agrégat est utilisé pour représenter l'effet polycristal.
 - Une méthode d'identification est mise en place permettant de bien reproduire les comportements macroscopiques du matériau à basses températures. La méthode d'identification fait usage des MCM pour réaliser une pré-identification, permettant un gain de temps substantiel. Par ailleurs, seuls 3 paramètres ajustables servent à caler le comportement.
 - Une étude détaillée des résultats des simulations, que ce soit pour la modélisation finale (agrégat) ou pour les étapes intermédiaires (passage maillage biphasé - modèle en β) permet de s'assurer de la validité des résultats obtenus en regard des hypothèses et observations de départ. Les choix de modélisation mènent à une représentation tout à fait pertinente de l'état de contrainte local au sein de la phase ferritique. Au niveau qualitatif et quantitatif, les tendances observées expérimentalement sont bien décrites.
 - Dans l'ensemble, les niveaux de contraintes moyens par phase sont bien reproduits. Par ailleurs, la mise en oeuvre du modèle pour simuler des essais expérimentaux de DRX conduit à une tendance tout à fait satisfaisante des résultats, malgré quelques limites. On reproduit l'allure des hétérogénéités à une échelle micromécanique (méthode des $\sin^2\psi$), et ce sans formuler d'hypothèses supplémentaires. On valide ainsi aussi bien la représentation des hétérogénéités de contraintes inter-phases (la pente moyenne de la courbe $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$), que les hétérogénéités au sein de la phase ferritique (la tendance des oscillations).
-

Bibliographie

- [Alpers et al., 2006] ALPERS A., POULSEN H.F., KNUDSEN E., ET HERMAN G.T. (2006). *Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials : Representativity of samples of two materials from food industry*. J. Appl. Cryst., vol. 39, pp 582–588.
- [Amiot et al., 2005] AMIOT F., ROGER J.-P., ET AL. (2005). *Mesure de champs de déplacement pour des MEMS*. Actes du XVIIe Congrès Français de Mécanique, pp CD Rom–765.pdf. Association Française de Mécanique.
- [Anand, 2004] ANAND L. (2004). *Single-crystal elasto-viscoplasticity : application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains*. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., vol. 193, pp 5359–5383.
- [Babout et al., 2003] BABOUT L., LUDWIG W., MAIRE E., ET BUFFIÈRE J.Y. (2003). *Damage assessment in metallic structural material using high resolution synchrotron X-Ray tomography*. Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research B, vol. 200, pp 303–307.
- [Barbe, 2000] BARBE F. (2000). *Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Barbe et al., 2001a] BARBE F., DECKER L., JEULIN D., ET CAILLETAUD G. (2001a). *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1 : F.E. Model*. Int. J. Plasticity, vol. 17, pp 513–536.
- [Barbe et al., 2001b] BARBE F., FOREST S., ET CAILLETAUD G. (2001b). *Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2 : Results*. Int. J. Plasticity, vol. 17, pp 537–563.
- [Batdorf et Budiansky, 1949] BATDORF S.B ET BUDIANSKY B. (1949). *A mathematical theory of plasticity based on the concept of slip*. pp 1871–. NACA-TN.
- [Beaudoin et al., 1993] BEAUDOIN A.J., MATHUR K.K., DAWSON P.R., ET JOHNSON G.C. (1993). *Three-dimensional deformation process simulation with explicit use of polycrystal plasticity models*. Int. J. Plasticity, vol. 9, pp 833–860.
- [Berbenni, 2002] BERBENNI S. (2002). *Elastoviscoplasticité des aciers polycristallins : Modélisation micromécanique et physique. Applications au comportement dynamique et çal'effet Bake-Hardening*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Berveiller et Zaoui, 1979] BERVEILLER M. ET ZAOUÏ A. (1979). *An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 26, pp 325–344.
- [Besson et al., 2001a] BESSON J., CAILLETAUD G., CHABOCHE J.-L., ET FOREST S. (2001a). *Mécanique non-linéaire des matériaux*. Hermès, France.
- [Besson et al., 2001b] BESSON J., STEGLICH D., ET BROCKS W. (2001b). *Modeling of crack growth in round bars and plane strain specimens*. Int. J. Sol. Struct., vol. 38, pp 8259–8284.
- [Bilger, 2003] BILGER N. (2003). *Etude micromécanique de l'effet de la présence d'amas d'inclusions sur la transition fragile-ductile d'aciers nucléaires*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.
- [Bornert et al., 2001a] BORNERT M., BRETHEAU T., ET GILORMINI P. (2001a). *Homogénéisation en mécanique des matériaux I*. chapitre : 1. Changement d'échelle : motivation et méthodologie (par A. Zaoui), pp 19–39. Hermès Science, Paris.

- [Bornert et al., 2001b] BORNERT M., BRETHERAU T., ET GILORMINI P. (2001b). *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1*. chapitre : 6. Application (par P. Gilormini), pp 223–248. Hermès Science, Paris.
- [Bornert et al., 2001c] BORNERT M., BRETHERAU T., ET GILORMINI P. (2001c). *Homogénéisation en mécanique des matériaux 1*. chapitre : 4. Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoires (par D. Jeulin), pp 95–129. Hermès Science, Paris.
- [Bornert et al., 2001d] BORNERT M., BRETHERAU T., ET GILORMINI P. (2001d). *Homogénéisation en mécanique des matériaux 2*. chapitre : 1. Plasticité, approche en champs moyens (par A. Zaoui), pp 17–42. Hermès Science, Paris.
- [Buchheit et al., 2005] BUCHHEIT T.E., WELLMAN G.W., ET BATTAILLE C.C. (2005). *Investigating the limits of polycrystal plasticity modeling*. Int. J. Plasticity, vol. 21, pp 221–249.
- [Bugat, 2000] BUGAT S. (2000). *Comportement et endommagement des aciers austéno-ferritiques vieillis : une approche micromécanique*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Cailletaud, 1988] CAILLETAUD G. (1988). *Une approche micromécanique du comportement des polycristaux*. Rev. Phys. Appl., vol. 23, pp 353–365.
- [Cailletaud et Pilvin, 1994] CAILLETAUD G. ET PILVIN P. (1994). *Utilisation de modèles polycristallins pour le calcul par éléments finis*. Rev. Européenne des Éléments Finis, vol. 3, pp 515–541.
- [Carrere, 2001] CARRERE N. (2001). *Sur l'analyse multi-échelles des matériaux composites çamatrice métallique : application au calcul de structure*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.
- [Chaussidon et al., 2006] CHAUSSIDON J., FIVEL M., ET RODNEY D. (2006). *The glide of screw dislocations in bcc Fe : Atomistic static and dynamic simulations*. Acta Mater., vol. 54, pp 3407–3416.
- [De-Souza-Neto et al., 2005] DE-SOUZA-NETO E.A, ANDRADE-PIRES F.M., ET OWEN D.R.J. (2005). *F-bar based linear triangles and tetrahedra for finite strain analysis of nearly incompressible solids. Part I : formulation and benchmarking*. Int. J. Numer. Meth. Eng., vol. 52, pp 353–383.
- [Decker et Jeulin, 2000] DECKER L. ET JEULIN D. (2000). *Simulation 3D de matériaux aléatoires polycristallins*. Rev. Métall./CIT Sc. et Tech. des Mat., vol. , pp 271–275.
- [Dexet et al., 2005] DEXET M., CREPIN J., GELEBART L., ZAOUÏ A., ET SAUZAY M. (2005). *Etude de l'application des conditions aux limites lors d'un couplage EBSD - Microextensométrie - Eléments finis*. Actes du XVIIe Congrès Français de Mécanique, pp CD Rom–132.pdf. Association Française de Mécanique.
- [Diard, 2001] DIARD O. (2001). *Un exemple de couplage, comportement-endommagement-environnement, dans les polycristaux. Application çal'interaction pastille-gaine*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Diard et al., 2005] DIARD O., LECLERQ S., ROUSSELIER G., ET CAILLETAUD G. (2005). *Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity - Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries*. Int. J. Plasticity, vol. 21, pp 691–722.

- [Doumalin, 2000] DOUMALIN P. (2000). *Microextensométrie locale par corrélation d'images numériques, application aux études micromécaniques par microscopie électronique çabalayage*. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique.
- [Dvorak et al., 1994] DVORAK G., BAHEI.EL.DIM Y.A., ET Wafa A.M. (1994). *The modelling of inelastic composites materials using the transformation field analysis*. *Modell. Simulat. Mater. Sci. Eng.*, vol. 2, pp 571–586.
- [Erieau et Rey, 2004] ERIEAU P. ET REY C. (2004). *Modeling of deformation and rotation bands and of deformation induced grain boundaries in IF steels aggregate during large plane strain compression*. *Int. J. Plasticity*, vol. 20, pp 1763–1788.
- [Eshelby, 1957] ESHELBY J.D. (1957). *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems*. *Proc. Roy. Soc. London A*, vol. 241, pp 376–396.
- [Feyel et Chaboche, 2000] FEYEL F. ET CHABOCHE J.-L. (2000). *FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of lon fibre SiC-Ti composite materials*. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, vol. , pp 309–330.
- [Fivel et Forest, 2004] FIVEL M. ET FOREST S. (2004). *Plasticité cristalline et changements d'échelles : cas du monocristal*. *Techniques de l'Ingénieur*. M4016.
- [Fivel et al., 1998] FIVEL M.C., ROBERTSON C., CANOVA G.R., ET BOULANGER L. (1998). *Three dimensionnal modeling of indent-induced plastic zone at a mesoscale*. *Acta Mater.*, vol. 46, pp 6183–6194.
- [Forest et al., 2002] FOREST S., CAILLETAUD G., JEULIN D., FEYEL F., GALLIET I., MOUNOURY V., ET QUILICI S. (2002). *Introduction au calcul de microstructures - Elements of microstructural mechanics*. *Mécaniques et Industries*, vol. 3, pp 439–456.
- [Forest et al., 2006] FOREST S., JEULIN D., HOUDAIGUI F. EL, KANIT T., MADI K., N'GUYEN F., ZEGHADI A., ET BOUSSUGE M. (2006). *Calcul de microstructures a morphologies 3D complexes : des crèmes glacées aux réfractaires*. *Actes de Mecamat-Aussois 2006*, pp CD–Rom–compilVendredi27AM.pdf. éd. Mecamat-EDF.
- [Franciosi, 1984] FRANCIOSI P. (1984). *Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi-statique*. Thèse de Doctorat, Université de Paris-Nord.
- [Franciosi, 1985] FRANCIOSI P. (1985). *The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals*. *Acta Metall.*, vol. 33, pp 1601–1612.
- [Franciosi et Zaoui, 1991] FRANCIOSI P. ET ZAOUÏ A. (1991). *Crystal hardening and the issue of uniqueness*. *Int. J. Plasticity*, vol. 7, pp 295–311.
- [Fu et al., 2004] FU H.H., BENSON D.J., ET MEYERS M. (2004). *Computational description of nanocrystalline deformation based on crystal plasticity*. *Acta Metall.*, vol. 52, pp 4413–4425.
- [Gelebart, 2005] GELEBART L. (2005). *Analyse de microstructures Théoriques et Expérimentales (AmiTeX)*. *Actes du XVIIe Congrès Français de Mécanique*, pp CDRom–59.pdf. Association Française de Mécanique.
- [Hill, 1965] HILL R. (1965). *Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals*. *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 13, pp 89–101.
- [Hoc et al., 2003] HOC T., CRÉPIN J., GELEBART L., ET ZAOUÏ A. (2003). *A procedure for identifying the plastic behavior of single crystals from the local response of polycrystals*. *Acta Mater.*, vol. 51, pp 5477–5488.

- [Hoc et Forest, 2001] HOC T. ET FOREST S. (2001). *Polycrystal modelling of IF-Ti steel under complex loading path*. Int. J. Plasticity, vol. 17, pp 65–85.
- [Hutchinson, 1976] HUTCHINSON J.W. (1976). *Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials*. Proc. Roy. Soc. London A, vol. 348, pp 101–127.
- [Kanit et al., 2006] KANIT T., NGUYEN F., FOREST S., JEULIN D., REED M., ET SINGLETON S. (2006). *Apparent and effective physical properties of heterogeneous materials : Representativity of samples of two materials from food industry*. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., vol. 195, pp 3960–3982.
- [Kelly et Nicholson, 1971] KELLY A. ET NICHOLSON R.B. (1971). *The deformation of plastically non-homogeneous alloys*, pp 137–192. Applied Science Publishers, London.
- [Knap et Ortiz, 2001] KNAP J. ET ORTIZ M. (2001). *An analysis of the quasi-continuum method*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 49, pp 1899–1923.
- [Krier, 1993] KRIER J. (1993). *Influence des hétérogénéités élastoplastiques sur les contraintes du deuxième ordre dans les polycristaux métalliques mono- et polyphasés : calculs autocohérents - Mesures par diffraction des rayons X*. Thèse de Doctorat, Université de Metz.
- [Kubler, 2004] KUBLER R. (2004). *Comportement thermomécanique des aciers à effet TRIP : Approches micromécaniques et phénoménologiques. Application à la mise en forme*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Lambert-Perlade, 2001] LAMBERT-PERLADE A. (2001). *Rupture par clivage de microstructures d'aciers bainitiques obtenues en conditions de soudage*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Lemaître J., 1993] LEMAITRE J. CHABOCHE J.L. (1993). *Mécanique des matériaux solides*. Seconde Edition. Editions Dunod.
- [Li et al., 2002] LI J., VLIET K.J. VAN, ZHU T., YIP S., ET SURESH S. (2002). *Atomistic mechanisms governing elastic limit and incipient plasticity in crystals*. Nature, vol. 418, pp 307–310.
- [Libert, 2006] LIBERT M. (2006). *Etude expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la transition ductile/fragile dans les aciers faiblement alliés*. Actes de Mecamat-Aussois 2006, pp CD–Rom ; Libert.pdf. éd. Mecamat-EDF.
- [Lin, 1957] LIN T.H. (1957). *Analysis of elastic and plastic strains of a FCC crystal*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 5, pp 143.
- [Lipinski, 1992] LIPINSKI P. (1992). *Modélisation du comportement des métaux en transformations élasto-plastiques finies à partir des méthodes de transition d'échelles*. Thèse de Doctorat, Université de Metz.
- [Lorrain, 2005] LORRAIN J.-P. (2005). *Critère de ductilité basé sur la perte d'ellipticité du module tangent élastoplastique déduit d'un modèle autocohérent*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Mandel, 1963] MANDEL J. (1963). *Une généralisation de la théorie de la plasticité de W.T. Koiter*. Int. J. Sol. Struct., vol. 1, pp 273–295.
- [Masson et al., 2000] MASSON R., BORNERT M., SUQUET P., ET ZAOUÏ A. (2000). *An affine formulation for the prediction of the effective properties of nonlinear composites and polycrystals*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 48, pp 1203–1227.

- [M' Cirdi, 2000] M' CIRDI L. (2000). *Comportement et endommagement sous sollicitation mécanique d'un acier austéno-ferritique moulé vieilli*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- [Méric et Cailletaud, 1991] MÉRIC L. ET CAILLETAUD G. (1991). *Single crystal modelling for Structural Calculations : Part 2 - F.E. Implementation*. J. Eng. Mat. Tech., vol. 113, pp 171–182.
- [Méric et al., 1994] MÉRIC L., CAILLETAUD G., ET GASPERINI M. (1994). *F.E. Calculations on copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests*. Acta Metall. Mater., vol. 42, pp 921–935.
- [Michel et Suquet, 2004] MICHEL J.-C. ET SUQUET P. (2004). *Computational analysis of nonlinear composite structure using the nonuniform transformation field analysis*. Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng., vol. 193, pp 5477–5502.
- [Mika et Dawson, 1998] MIKA D.P. ET DAWSON P.R. (1998). *Effect of grain interaction on deformation in polycrystals*. Mat. Sc. Eng., vol. 257, pp 62–76.
- [Molinari et al., 2004] MOLINARI A., HOUDAIGUI F. EL, ET TÓTH L.S. (2004). *Validation of the tangent formulation for the solution of the non-linear Eshelby inclusion problem*. Int. J. Plasticity, vol. 20, pp 291–307.
- [Monnet et al., 2004] MONNET G., DEVINCRE B., ET KUBIN L.P. (2004). *Dislocation study of prismatic slip systems and their interactions in hexagonal close packed metals : application to zirconium*. Acta Mater., vol. 52, pp 4317–4328.
- [Mori et Tanaka, 1973] MORI T. ET TANAKA K. (1973). *Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions*. Acta Metall., vol. 21, pp 571–574.
- [Obtlik et al., 2006] OBRTLİK K., ROBERTSON C.F., ET MARINI B. (2006). *Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension*. J. of Nucl. Mat., vol. 342, pp 35–41.
- [Osipov et Cailletaud, 2006] OSIPOV N. ET CAILLETAUD G. (2006). *Multiscale microstructure generation*. Actes de Mecamat-Aussois 2006, pp CD–Rom ; Osipov.pdf. éd. Mecamat-EDF.
- [Ostesky et al., 2005] OSTESKY Y.N., STOLLER R.E., RODNEY D., ET BACON D.J. (2005). *Atomic-scale details of dislocation-stacking fault tetrahedra interaction*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 400, pp 370–373.
- [Parisot et al., 2000] PARISOT R., FOREST S., GOURGUES A.-F., PINEAU A., ET MAREUSE D. (2000). *Modeling the mechanical behavior of a multicroystalline zinc coating on a hot-dip galvanized steel sheet*. Comput. Mat. Sci., vol. 19, pp 189–204.
- [Pesci, 2004] PESCI R. (2004). *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Pesci et al., 2006] PESCI R., INAL K., ET MASSON R. (2006). *A crystallographic approach of brittle fracture in the 16MND5 bainitic steel. In situ X-Ray diffraction and scanning electron microscope measurements at low temperatures*. Proceedings of 9th European Mechanics of Materials Conference.
- [Pilvin, 1988] PILVIN P. (1988). *Identification des paramètres de lois de comportements*. Proceedings of the int. seminar Mecamat 88 - Inelastic Behaviour of Solids ; Models and Utilization - Besançon. AFM.

- [Ponte-Castaneda, 1991] PONTE-CASTANEDA P. (1991). *The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 39, pp 45–71.
- [Ponte-Castaneda, 2002] PONTE-CASTANEDA P. (2002). *Second-order homogenization estimates for nonlinear composites incorporating field fluctuation : I-Theory*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 50, pp 827–862.
- [Poulsen, 2006] POULSEN H.F. (2006). *Grain maps and Grain dynamics - A reconstruction challenge*. New Mathematics and Algorithms for 3D Image Analysis - Minneapolis 2006.
- [Press, 1992] PRESS W.H. (1992). *Numerical Recipes in FORTRAN 77 - The art of scientific computing*. Cambridge University Press.
- [Quicili et Cailletaud, 1999] QUICILI S. ET CAILLETAUD G. (1999). *FE simulation of macro-, meso- and micro-scales in polycrystalline plasticity*. Comput. Mat. Sci., vol. 16, pp 383–390.
- [Renevey, 1998] RENEVEY S. (1998). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay - CEA.
- [Rey et al., 2006] REY C., LIBERT M., DELFOSSE J., ET MARINI B. (2006). *Simulation des champs mécaniques locaux pour différentes microstructures et agrégats*. Actes de Mecamat-Aussois 2006, pp CD–Rom : compilMercredi25PM.pdf. éd. Mecamat-EDF.
- [Rodney et Philipps, 1999] RODNEY D. ET PHILIPPS R. (1999). *Structure and strength of dislocations junctions : An atomic level analysis*. Phys. Rev. Letters, vol. 82, pp 1704–1707.
- [Roters, 2005] ROTERS F. (2005). *Application of crystal plasticity FEM from single crystal to bulk polycrystal*. Comput. Mat. Sci., vol. 32, pp 509–517.
- [Roy et Acharya, 2006] ROY A. ET ACHARYA A. (2006). *Size effects and idealized dislocation microstructure at small scales : Predictions of a phenomenological model of mesoscopic field dislocation mechanics : Part II*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 54, pp 1711–1743.
- [Sabar et al., 2002] SABAR H., BERVEILLER M., FAVIER V., ET BERBENNI S. (2002). *A new class of micro-macro models for elastic-viscoplastic heterogeneous materials*. Int. J. Sol. Struct., vol. 39, pp 3257–3276.
- [Sachs, 1928] SACHS G. (1928). *Zur Ableitung einer Fliessbedingung*. Zeitschrift der VDI, vol. 72, pp 734–736.
- [Sekfali, 2004] SEKFALI S. (2004). *Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Tabourot, 1992] TABOUROT L. (1992). *Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes déformations*. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble.
- [Takahashi, 1988] TAKAHASHI H. (1988). *Prediction of plastic stress-strain relations of polycrystals based on the Lin model*. Int. J. Plasticity, vol. 4, pp 231–250.
- [Tang et al., 1998] TANG M., KUBIN L.P., ET CANOVA G.R. (1998). *Dislocation mobility and the mechanical response of BCC single crystals : a mesoscopic approach*. Acta Met. Mater., vol. 46, pp 3221–3235.
- [Tanguy, 2001] TANGUY B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.

- [Taoka et al., 1964] TAOKA T., TAKEUCHI S., ET FURUBAYASHI E. (1964). *Slip systems and their critical shear stress in 3% silicon iron*. J. Phys. Soc. Japan, vol. 19, pp 701–711.
- [Taylor, 1938] TAYLOR G.I. (1938). *Plastic strain in metals*. J. Inst. Metals., vol. 32, pp 307–324.
- [Vitek et al., 2004] VITEK V., MROVEC M., ET BASSANI J.L. (2004). *Influence of non-glide stress on plastic-flow : from atomistic to continuum modeling*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 365, pp 31–37.
- [Zeghadi, 2005] ZEGHADI A. (2005). *Calculs d'agrégats polycristallins : effet de surface et effet de taille de grain*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.

Chapitre -V-

Approche locale micromécanique du clivage

Sommaire

V.1	Remarques préliminaires	154
V.2	Étude bibliographique	155
	V.2.1 Mécanismes et explications de la rupture fragile par clivage . .	155
	V.2.2 Revue des études sur la rupture par clivage des aciers	163
	V.2.3 Modélisations de la rupture par clivage, les approches statistiques	176
V.3	Une approche locale à l'échelle microscopique	193
	V.3.1 Mise en place du problème	193
	V.3.2 Méthodologie de traitement des simulations : obtention d'une probabilité de rupture cumulée	194
	V.3.3 Comparaison de l'allure de la probabilité avec celle de l'approche de Beremin	201
	V.3.4 Étude paramétrique	201
	V.3.5 Comparaison de la démarche utilisée avec des données expérimentales	207
	V.3.6 Effet du chargement sur les paramètres de Weibull	208
	V.3.7 Discussion	216
	Bibliographie	221

Introduction

La première partie de ce chapitre est l'occasion de faire le point sur les connaissances actuelles en matière de rupture fragile intragranulaire des aciers : les explications physiques y attendant et les modélisations locales mises en place pour rendre compte des phénomènes de rupture y sont rappelés. On a délibérément choisi de présenter d'abord les aspects théoriques et le cheminement ayant mené vers les modélisations. Par la suite, on tente de donner un aperçu des connaissances actuelles (et donc des questions toujours en suspens...) quant aux phénomènes impliqués dans la rupture fragile des aciers de cuve, en effectuant une synthèse des hypothèses et constatations faites jusqu'à ce jour. Cela permet par la suite de poser simplement les bases permettant une meilleure compréhension des nombreuses problématiques soulevées par la rupture fragile des aciers, et notamment de l'acier de cuve, avant d'exposer l'étude de la rupture fragile par l'approche locale.

La seconde partie présente une modélisation à l'échelle micromécanique de la rupture fragile de l'acier de cuve. Elle permet de mettre en place le traitement d'une simulation de chargement sur agrégat afin de déterminer la probabilité de rupture cumulée de celui-ci, en fonction des hypothèses faites sur les mécanismes de rupture fragile.

Enfin, la troisième partie applique cette méthodologie en faisant varier les paramètres influents aussi bien sur le chargement (température, triaxialité) que sur les micromécanismes de rupture.

V.1 Remarques préliminaires

La rupture de l'acier 16MND5, et d'une manière plus générale des matériaux cristallins, a fait l'objet de nombreuses recherches desquelles on peut dégager une tendance globale qui tend à dissocier les deux phénomènes que sont la rupture fragile aux basses températures et la rupture ductile aux plus hautes températures. Le domaine de transition fait lui aussi bien souvent l'objet d'une modélisation à part entière. Une modélisation permettant de rendre compte de manière continue de la rupture sur la plage complète de comportements serait bien évidemment la panacée. Toutefois à ce jour, aucune modélisation ne prenant en compte l'ensemble des phénomènes physiques observés n'a permis une bonne estimation de la ténacité du matériau sur l'ensemble de la plage de températures couvrant la rupture fragile, la transition et la rupture ductile.

Nous ne nous intéresserons dans ces travaux qu'à la rupture fragile des aciers faiblement alliés, et plus particulièrement de l'acier 16MND5. Historiquement, cette problématique est montée sur le devant de la scène au début des années 50, suite à la rupture brutale des joints

soudés des navires Liberty Ships de la seconde guerre mondiale. Des premières hypothèses concernant les micromécanismes amenant à la rupture par clivage [Zener, 1948], aux approches locales de la rupture [Beremin, 1983], de nombreux développements scientifiques ont accompagné une connaissance grandissante des phénomènes impliqués dans la rupture fragile (et donc brutale) des aciers faiblement alliés, les échelles prises en compte allant de l'atome à la structure. Le cas de l'acier 16MND5 est lui aussi traité depuis de nombreuses années, que ce soit par des approches de rupture globale [Wallin, 1984], ou par l'approche locale [Mudry, 1987] de la rupture.

Pour des raisons de commodité et de sécurité évidentes, les études expérimentales du comportement et de la rupture des aciers de cuve sont effectuées à basses températures sur des matériaux non irradiés. Cela permet de se placer simplement dans des conditions où la rupture fragile catastrophique est observable, sachant que la rupture est plutôt ductile stable aux températures ambiantes.

V.2 Étude bibliographique

V.2.1 Mécanismes et explications de la rupture fragile par clivage

La rupture fragile est généralement associée à deux phénomènes : le clivage et la rupture fragile intergranulaire. La rupture intergranulaire n'est pas observée pour le matériau étudié dans les conditions d'utilisation. Nous laisserons donc cet aspect de côté, en invitant à se reporter aux travaux de Yahya sur la rupture de l'acier 16MND5 soumis à un traitement de fragilisation intergranulaire [Yahya, 1997].

Le clivage est défini comme la décohésion complète d'un cristal selon l'un de ses plans cristallographiques. La contrainte locale théorique nécessaire à cette séparation du réseau cristallin est très élevée, et s'exprime en fonction de la distance inter-réticulaire et de l'énergie de surface [Français et al., 1993] :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{E\gamma_s}{d_{hkl}}} \quad (5.1)$$

où E est le module d'Young, γ_s l'énergie de surface et d_{hkl} la distance inter-réticulaire. Les plans les plus susceptibles de cliver seront donc ceux dont le rapport de l'énergie de surface sur la distance inter-réticulaire $\frac{\gamma_s}{d_{hkl}}$ sera faible, ce qui est le cas pour les familles de plans de type $\{100\}$ de la ferrite.

Toutefois, l'expérience montre [Reed-Hill, 1973] que les structures se rompent très souvent par clivage pour des contraintes macroscopiques appliquées bien inférieures à cette contrainte critique. Seuls certains matériaux extrêmement purs (trichites ou "whiskers" en anglais) vérifient l'ordre de grandeur des valeurs théoriques. Il semble dès lors nécessaire de mettre en évidence la présence de structures jouant un rôle d'amplificateurs de contraintes, voire d'amorces de rupture dans les autres matériaux. Dans le cas des aciers, ce sont les

nombreux défauts qui jouent ce rôle, qu'ils soient dûs à la plasticité (dislocations) ou à la composition de l'acier (inclusions, fissures).

Le rôle des éléments d'alliage dans ce mécanisme dépend de leur effet sur les joints de grains¹. En effet si des inclusions cohérentes avec la matrice sont formées aux joints de grains, elles peuvent renforcer ceux-ci et favoriser le clivage ; au contraire, certaines espèces en y ségrégeant vont les affaiblir et favoriser la rupture intergranulaire. Le carbone, lorsqu'il forme des carbures aux joints de grains, les renforce, et est ainsi un élément qui facilite la rupture par clivage intragranulaire. Les éléments d'addition ont aussi un effet sur la matrice de par leur présence dans la solution solide. Le rôle des amas de sulfure de manganèse n'est pas discuté ici.

Le clivage des aciers ferritiques est généralement décrit en trois étapes successives : la germination, la propagation, et le franchissement des barrières micro-structurales. Dans le cadre d'une prise en compte des mécanismes de clivage dans un modèle de rupture, seule une de ces trois étapes pourra, sous certaines conditions, être utilisée pour définir un critère de rupture. Par exemple, si la germination nécessite une contrainte supérieure à celles des deux autres étapes, les fissures seront instables dès leur création, et ne nécessiteront pas l'utilisation des critères inhérents aux autres étapes.

a) La germination : le lien entre clivage et plasticité

C'est dans les mécanismes de la plasticité, et notamment dans la physique des dislocations, que l'on trouve des explications du phénomène de germination d'une microfissure, et ce, selon divers mécanismes ayant pour source la plasticité ou le maclage. Ces mécanismes ont été notamment répertoriés par Thompson [Thompson et Knott, 1993].

Mécanisme de Zener-Stroh : Ce mécanisme, illustré sur la figure V.1, a tout d'abord été évoqué par Zener [Zener, 1948], puis explicité par Stroh [Stroh, 1954]. C'est ici un empilement de dislocations sur un obstacle (particules de secondes phases, joints de grains) qui crée un champ de contraintes associé et déclenche le clivage de l'obstacle ou de la matrice l'entourant. Ce champ de contraintes présente en tête d'empilement une singularité comparable à celle résultant d'une fissure dans un milieu élastique :

$$\sigma = (\tau - \tau_i) \sqrt{\frac{d}{r}} \cdot f(\theta) \quad (5.2)$$

où τ est la cission résolue, τ_i est la friction de réseau, d la longueur d'empilement (parfois remplacée par la demi-taille de grain), r et θ représentant les coordonnées polaires ayant l'extrémité de l'empilement pour origine. En utilisant la contrainte de cohésion du réseau (5.1) comme critère pour le déclenchement du clivage. Il vient alors comme contrainte critique de clivage :

¹ceux-ci étant d'ailleurs particulièrement difficiles à définir dans le cas de la bainite, celle-ci ne présentant pas à proprement parler une structure en grains, mais plutôt en paquets de lattes

$$\tau_c - \tau_i = \frac{1}{f(\theta = 70,5^\circ)} \cdot \sqrt{\frac{E\gamma_s}{d}} \quad (5.3)$$

l'angle de $70,5^\circ$ étant déterminé par analogie entre le chargement mécanique sur l'empilement et l'évolution d'une fissure en mode II [Miannay, 1995].

Mécanisme de Cottrell : La figure V.2 présente, pour un réseau de structure CC la réaction de deux dislocations glissiles (et par extension de deux bandes de glissement), qui peuvent donner naissance à une "super-dislocation". Celle-ci conduit à l'amorçage du clivage. Cottrell utilise un critère de type propagation pour seuiller la germination [Cottrell, 1958] :

$$\sigma_c = \frac{2\mu \cdot \Gamma_s}{d} \quad (5.4)$$

où μ représente le module d'élasticité en cisaillement, et Γ_s l'énergie de surface effective en cours de propagation :

$$\Gamma_s = \gamma_s + \gamma_p + \gamma_b \quad (5.5)$$

avec γ_p l'énergie de propagation plastique en pointe de fissure et γ_b l'énergie nécessaire au franchissement des barrières microstructurales (rivières et marches) en cours de propagation. Il est à noter que cette expression pourra être utilisée quel que soit le processus de germination, et permet de rendre compte de la relation entre taille de grain et sensibilité au clivage.

Une utilisation intéressante de cette approche a été faite par Bugat pour un acier austéno-ferritique inoxydable [Bugat, 2000]. Le modèle de Cottrell permet de lier, grâce à l'approche micromécanique, la déformation plastique et donc les glissements sur chaque système au critère de rupture par clivage d'un plan de type $\{100\}$. Une modification du modèle est cependant mise en place afin de prendre en compte les glissements sur les plans de type $\{112\}$, ainsi que la déformation par maclage, ces modes de déformation ayant par ailleurs été identifiés clairement sur le matériau comme déclencheurs du clivage par observations microscopiques. Notons toutefois, comme le signale l'auteur, que les aciers austéno-ferritiques étudiés dans ces travaux permettent de privilégier ce type de mécanisme de rupture par clivage plutôt qu'un autre. En effet, la ferrite γ est moins chargée en carbures et en structure de dislocations (puisque toute l'austénite ne s'est pas transformée) que celle qui constitue la bainite et elle sera plus facilement plastique.

Initiation par maclage : Ce mécanisme est proposé pour la première fois par Friedel [Friedel, 1964]. Le maclage peut, à la façon d'un empilement de dislocations, créer une concentration de contraintes suffisante pour déclencher le clivage. Bugat rappelle dans ses travaux le parallèle entre maclage et glissement : trois dislocations de maclage sont équivalentes à une dislocation de glissement au niveau des vecteurs de Burgers.

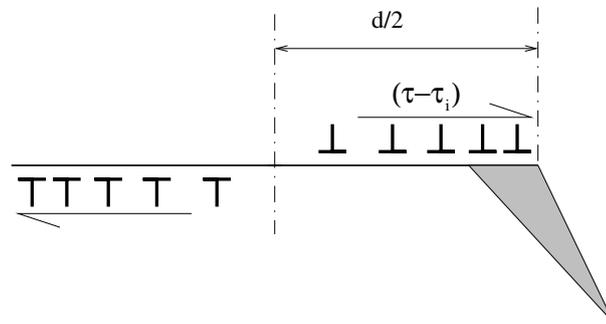


FIG. V.1 – Mécanisme d'amorce de rupture selon Zener et Stroh. [Stroh, 1954]

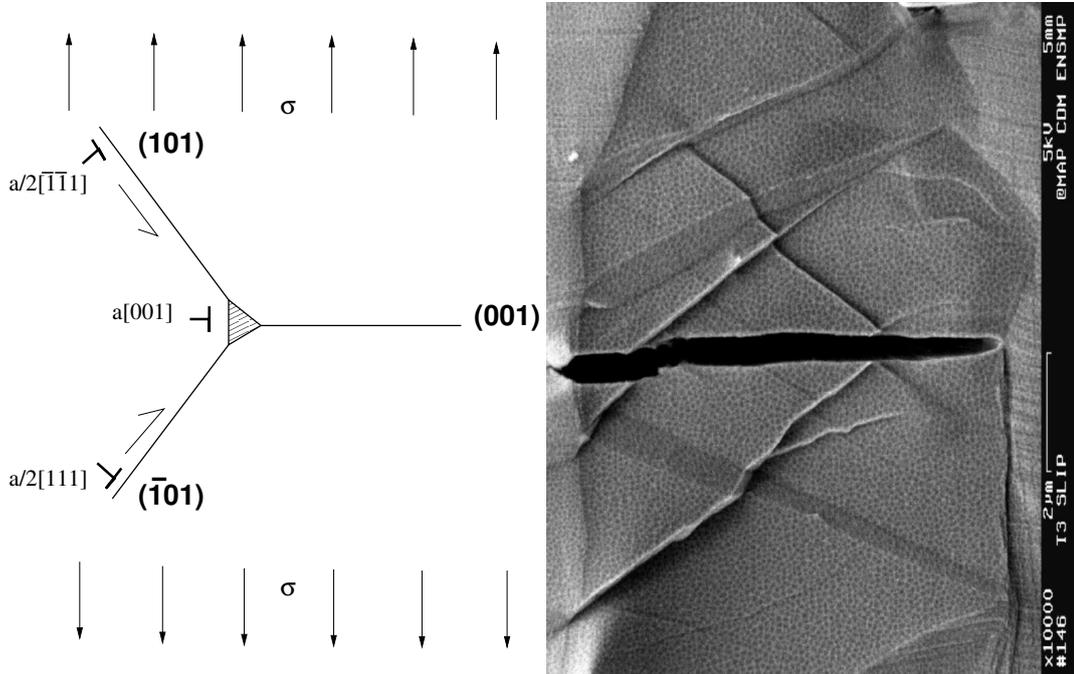


FIG. V.2 – Mécanisme d'amorce de rupture selon Cottrell [Cottrell, 1958]. Illustration d'une interaction entre lignes de glissement donnant lieu au clivage dans la ferrite d'un acier inoxydable austéno-ferritique [Bugat, 2000].

L'expression régissant cette germination est dès lors semblable à l'équation (5.3). Knott a observé (figure V.3) une amorce de clivage à l'intersection de macles [Curry, 1980].

La germination par maclage est généralement obtenue à de très basses températures, et est considérée, pour les aciers, comme inexistante pour les températures supérieures à -100°C . Pour l'acier bainitique, il ne semble pas pertinent de prendre en compte l'effet du maclage comme facteur déclenchant du clivage, y compris aux basses températures considérées (cf. II.1.3.a).

Modélisation de Smith : Smith [Smith, 1966] a particularisé le modèle de Stroh-Zener au cas d'un empilement de dislocations sur un carbure situé au joint de grains (figure V.4). Ici encore la longueur d représente la moitié de la taille de grain. Cette analyse permet de prendre en compte l'effet des dislocations sur l'effort permettant de propager la fissure, conduisant à l'expression suivante :

$$\frac{C_0}{d}\sigma_c^2 + (\tau - \tau_i)^2 \left[1 + 4/\pi \left(\frac{C_0}{d} \right)^{1/2} \frac{\tau_i}{\tau - \tau_i} \right]^2 = \frac{4E\gamma_s}{\pi(1-\nu^2)d} \quad (5.6)$$

Cette équation rend bien compte de l'influence de la taille des carbures observée expérimentalement : son augmentation conduit à une baisse de la contrainte de clivage nécessaire, indépendamment de la taille de grains.

b) La propagation d'un défaut

Griffith a proposé une analyse, par la mécanique de la rupture, de la contrainte qu'il faut appliquer pour que se propage une fissure de forme circulaire ("penny-shape") de rayon a [Griffith, 1920] :

$$\sigma_p = \sqrt{\frac{\pi E \gamma_R}{2(1-\nu^2)a}} \quad (5.7)$$

avec γ_R qui représente l'énergie de rupture. Une fois le stade de la nucléation passé, une fissure peut donc se propager sous une contrainte décroissante. Pour un solide chargé à force constante, on obtient une propagation instable, l'excès d'énergie disponible se transformant en énergie cinétique.

Cette propagation brutale peut toutefois être freinée par un mécanisme de relaxation par glissement des dislocations. Il existe au voisinage de la pointe de fissure une très forte concentration de contraintes capable de mettre en mouvement les dislocations, qui ont tendance à provoquer un émoussement du clivage. La rupture devient alors fonction du rapport entre la facilité de propagation du clivage sous la contrainte de traction, et celle de créer et propager des dislocations qui provoquent cet émoussement.

Pour certains matériaux spécifiques, tel le mica dont la structure en couche empêche en théorie la transmission de dislocations et donc l'émoussement de fissure, ou même le

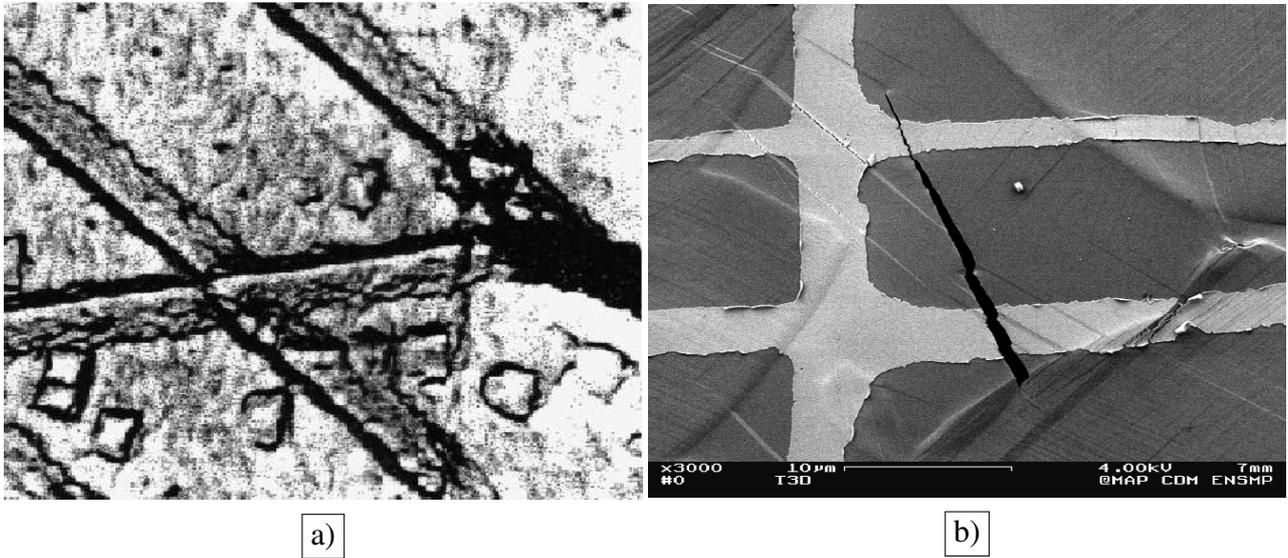


FIG. V.3 – a) Observation d'une amorce de rupture par intersection de macles (zoom 450 : 1) [Curry, 1980]. b) Observation d'une fissure de clivage amorcée sur les macles de la ferrite de l'acier inoxydable austéno-ferritique de la figure V.2, [Bugat, 2000].

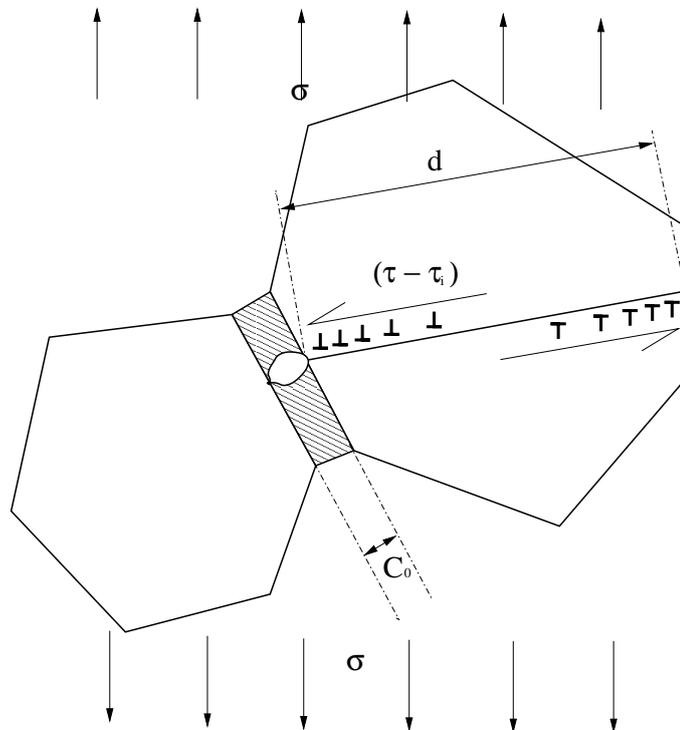


FIG. V.4 – Cas particulier de la modélisation de Stroh, la modélisation de Smith [Smith, 1966].

diamant, dont la force de Peierls-Nabarro est très haute, empêchant là aussi la mobilité des dislocations, la rupture interviendra toujours de manière fragile.

Pour les aciers, la situation est beaucoup moins claire comme le signale déjà [Thompson et Knott, 1993]. Aucune affirmation définitive ne peut être faite puisqu'aucun des mécanismes envisagés auparavant ne peut être considéré comme prédominant, sauf peut-être aux basses températures où il est bien connu que la propagation fragile de la rupture par clivage est facilitée.

Pour ce qui est de l'érouissage des fissures, les travaux en cours continuent d'alimenter les réflexions, où des approches analytiques variationnelles traitant de l'émission de dislocations [Schoeck, 2003] côtoient des approches de dynamique des dislocations discrètes [Deshpande et al., 2003] ou de simulation à l'échelle atomique [Machová et Beltz, 2004, Guo et al., 2003]. Ces derniers travaux sont présentés à la figure V.5.

c) Le franchissement des barrières microstructurales

La question de l'entité microstructurale contrôlant la propagation de la rupture par clivage s'ajoute dans le cas de microstructures complexes. S'il faut qu'une fissure soit capable de se propager sans être arrêtée par érouissage, il lui faudra aussi franchir certains obstacles pour ruiner la structure. Au niveau microscopique et pour les bainites, les deux entités identifiées sont le paquet bainitique de faible désorientation [Brozzo et al., 1978] ou la présence de colonies de carbures [Zhang et Knott, 1999]. Le choix de la taille d'un paquet bainitique s'explique par le fait qu'une fissure peut se voir déviée ou arrêtée par un joint de grains de forte désorientation (comme déjà évoqué en II.1.1.c) ou par une colonie de carbures.

Dans les deux cas, c'est la taille caractéristique de l'entité qui est considérée comme contrôlant la rupture. Wallin suggère que ce sont les carbures qui contrôlent le processus [Wallin et al., 1984], mais son approche est toutefois cohérente avec les travaux précédents puisqu'il lie taille des carbures et taille du paquet de lattes (tous deux étant contrôlés par le traitement thermique qui suit l'austénitisation pour une bainite).

La technique EBSD a permis plusieurs observations d'arrêts de fissures secondaires de clivage au niveau des joints de fortes désorientations, sur un acier 2-1/4 CR-1 Mo à microstructure bainitique [Bouyne et al., 1998], ou sur une structure plus proche de l'acier de cuve [Gourgues et al., 2000]. Les mêmes observations ont aussi été faites sur l'acier 16MND5 (figure V.6, [Nohava et al., 2003]), avec cette fois une utilisation plus poussée des informations fournies par EBSD : les plans de clivage cristallographiques ont été déterminés pour les fissures secondaires. Nohava *et al.* mettent ainsi en évidence que si le clivage s'amorce sur les plans {100}, les fissures secondaires de clivages peuvent aussi apparaître sur les plans des familles {110}, {112}, {123}, bien que leur énergie de décohésion soit bien plus grande que celle des plans de la famille {100}. Les auteurs remarquent que leur forte multiplicité augmente la probabilité de trouver un tel plan favorablement orienté pour le

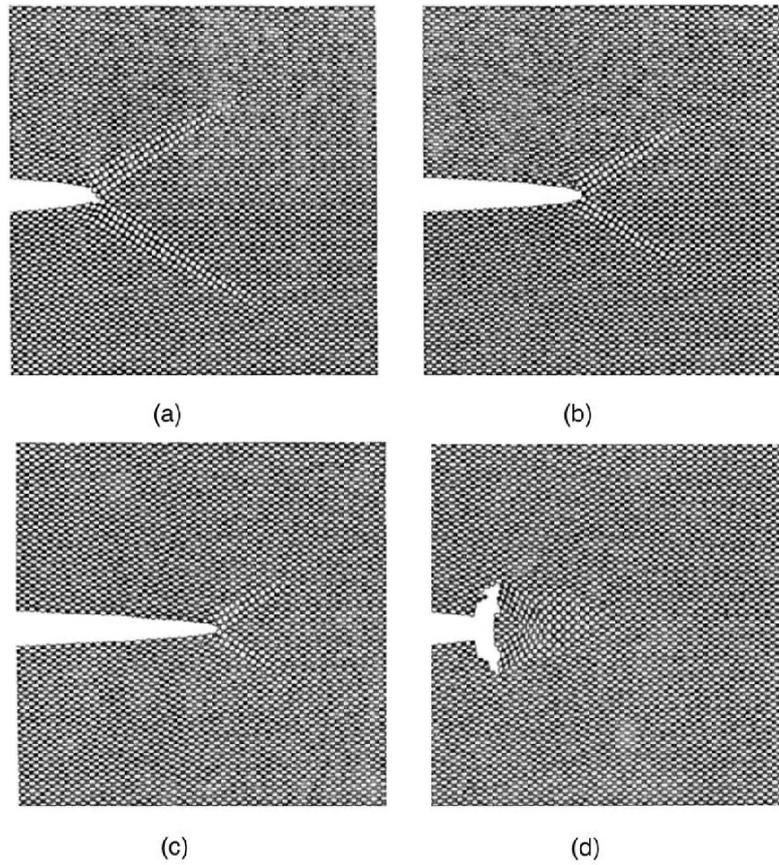


FIG. V.5 – Simulation à l'échelle atomique de l'émoussement de fissure pour une fissure de rapport $K_I = 2.2K_{IC}$ à (a) 5K (b) 100K (c) 200K et (d) 300K [Guo et al., 2003].

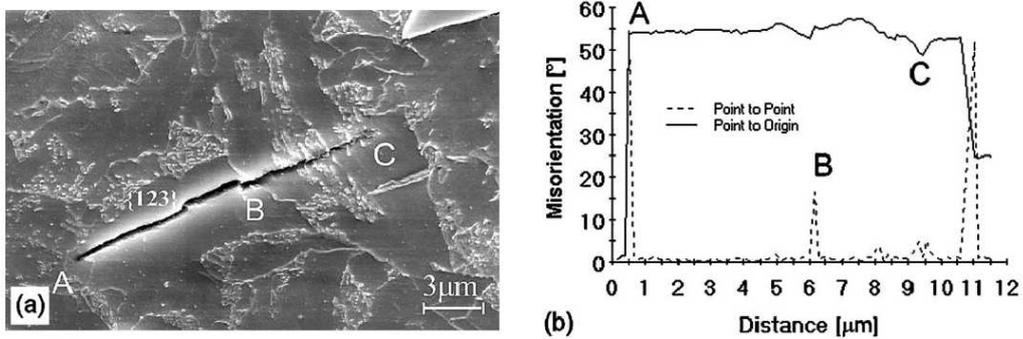


FIG. V.6 – (a) Fissure secondaire dans l'acier 16MND5, pour une éprouvette CT cassée à -60°C . (b) Profil de désorientation le long de la fissure. On remarque que la faible désorientation en B n'arrête pas la fissure, contrairement à la colonie de carbures en C.

clivage, d'autant plus que l'activité plastique pouvant prendre place sur ces plans peut créer les conditions favorables à l'apparition d'empilements de dislocations.

Il semble toutefois que ces fissures secondaires, qui apparaissent à proximité des facettes de clivage, ne soient qu'une conséquence visible de la rupture brutale par clivage, et des très forts gradients de contrainte qui en résultent, plutôt qu'un mécanisme autonome qui suffirait à expliquer la rupture. Rien ne permet de savoir si elles sont dues à l'avancée de la pointe de fissure principale, ou si elles sont effectivement des fissures de clivage amorcées avant la fissure principale et qui n'ont pas pu se propager.

V.2.2 Revue des études sur la rupture par clivage des aciers

Devant la multitude de résultats expérimentaux présents dans la littérature, il a été choisi de ne pas mener de campagne d'essais sur éprouvettes entaillées au cours de ces travaux. Les travaux précédents ont permis de construire une base de données suffisante concernant la rupture fragile de l'acier de cuve 16MND5 pour diverses températures et géométries d'éprouvettes.

Reste l'étude expérimentale visant à étudier les mécanismes de rupture fragile, et les phénomènes à l'origine du déclenchement du clivage. Les études fractographiques sur éprouvettes entaillées sont là aussi nombreuses. Enfin, l'étude ou l'observation des mécanismes du clivage lors d'essais in-situ reste confrontée à de nombreuses difficultés expérimentales.

La bibliographie présentée par la suite doit permettre de mettre en évidence les points faisant l'unanimité au sein de la communauté et ceux qui ne permettent pas de dégager un consensus.

On établira tout d'abord un récapitulatif des différents travaux comportant des études fractographiques tentant de pointer l'élément déclencheur du clivage dans les microstructures bainitiques.

Puis, on effectuera une revue des différents facteurs auxquels on a attribué une influence sur la rupture par clivage. Cette revue classe les paramètres déjà étudiés en deux catégories relativement distinctes : ceux qui sont liés avant tout au chargement (température, géométries), et ceux qui sont liés aux propriétés intrinsèques du matériau (microstructure, propriétés physiques). Les valeurs couramment admises ou déterminées des principaux paramètres régissant la rupture fragile seront répertoriées.

Ce récapitulatif sera fait avec l'idée sous-jacente de rassembler les informations nécessaires à l'établissement d'une modélisation de la rupture fragile, basée sur les calculs d'agrégats, et pouvant donc profiter de la description des champs mécaniques locaux.

a) Études fractographiques : recherche de l'entité responsable du clivage

La plupart du temps, on utilise une méthode relativement simple afin de déterminer l'élément cristallographique responsable de l'initiation de la rupture fragile des aciers : en

effet, la rupture par clivage se produisant au sein d'un matériau polycristallin, la fissure de clivage, si elle se propage est souvent déviée par les différents obstacles à sa propagation, tels que les joints de grains ou les bandes de glissements localisées, et forme ainsi un motif caractéristique : les rivières de clivages. Avec un peu d'expérience, il est souvent possible de "remonter" ces rivières (la propagation est considérée comme parallèle à ces rivières), et de déterminer l'endroit exact d'où s'est amorcé le clivage à une échelle très fine (figure V.7). Dès lors on peut identifier ou non la présence de particules, voire de traces chimiques de la présence d'une particule, grâce aux analyses chimiques EDX, disponibles in-situ.

On peut distinguer dès lors différentes hypothèses sur l'entité en mesure de déclencher le clivage : soit on considère qu'une particule de seconde phase est à l'origine du clivage, par sa décohésion ou sa rupture, soit on considère qu'une surface suffisante (gros paquet de lattes ou ensemble de paquets peu désorientés) orientée pour le clivage suffit à déclencher le clivage. Parfois, on considère que, notamment pour les plus hautes températures situées dans la transition, l'avancée d'une fissure ductile crée une surcontrainte en pointe de fissure amenant le clivage, ce qui ne pourra faire l'objet de la présente étude, qui n'inclura aucun aspect dynamique ou touchant à l'endommagement ductile.

Tanguy rappelle dans ses travaux de thèse que contrairement au résultat classiquement admis pour les aciers doux, l'origine du clivage ne peut pas être uniquement attribué aux seuls carbures [Tanguy, 2001]. Lorsque l'on parvient à identifier une espèce chimique ou un reste d'inclusion, il constate la présence de reste de sulfures de manganèses ou de carbures, pour un acier 16MND5 différent de BQ12. Son étude portant sur des essais Charpy dynamiques, il insiste fortement sur le rôle de la déchirure ductile comme préalable au clivage.

Pour l'acier BQ12, dans une série de travaux [Rossol, 1998, Renevey, 1998, Carassou, 1999], les sulfures de manganèses sont par contre désignés comme les principaux sites d'amorçage de la rupture fragile. L'hypothèse qui est faite est alors que des clusters de sulfures de manganèse se comportent comme un concentrateur de contrainte à l'échelle mésoscopique, permettant le déclenchement du clivage sur une particule de seconde phase. Ces considérations mènent à une modélisation relativement proche du modèle de Beremin, et ne permettent pas d'améliorer son caractère prédictif pour différentes températures ou géométries. En tous cas, ils ne considèrent pas les MnS ou les clusters de MnS comme une amorce de clivage.

On notera par ailleurs, que l'acier BQ12, qui est aussi étudié dans ces travaux semble être un cas particulier, puisqu'un rôle aussi fort des MnS n'a pu être identifié sur l'ensemble des autres nuances d'acier de cuve [Parrot, 2002]. Pesci [Pesci, 2004] n'a pour sa part quasiment pas pu observer directement de rupture par clivage, mais plutôt quelques zones de clivage certainement amorcées à la suite de la déchirure ductile, les conditions de ses essais (pour la plupart in-situ ce qui explique les difficultés d'interprétation) n'étant de toute façon pas suffisamment sévères pour amorcer un clivage "brutal".

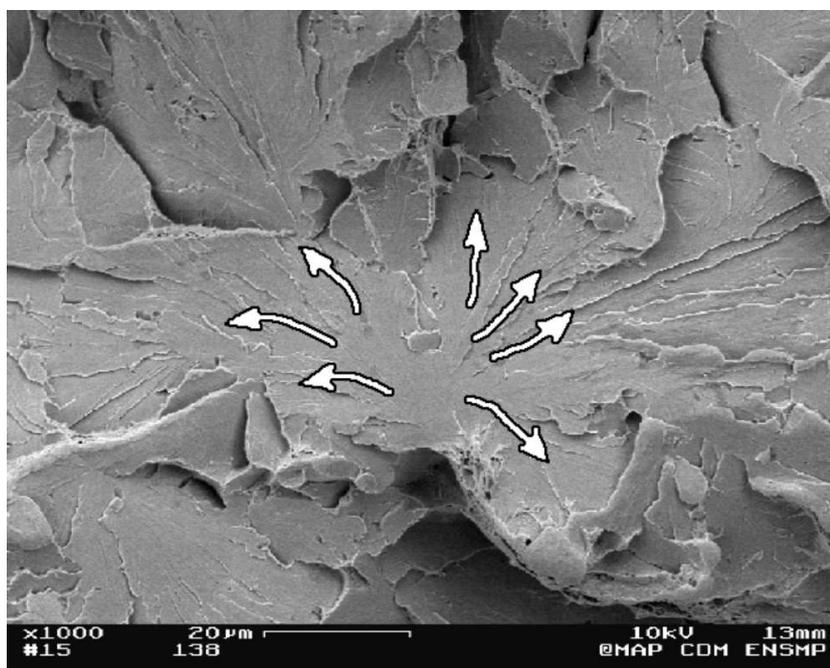


FIG. V.7 – Un site d’amorçage ne présentant pas de particule apparente à l’origine du clivage pour un acier 16MND5 d’après [Tanguy, 2001]. Éprouvette KCV testée à -70°C . Illustration des directions de propagation du clivage.

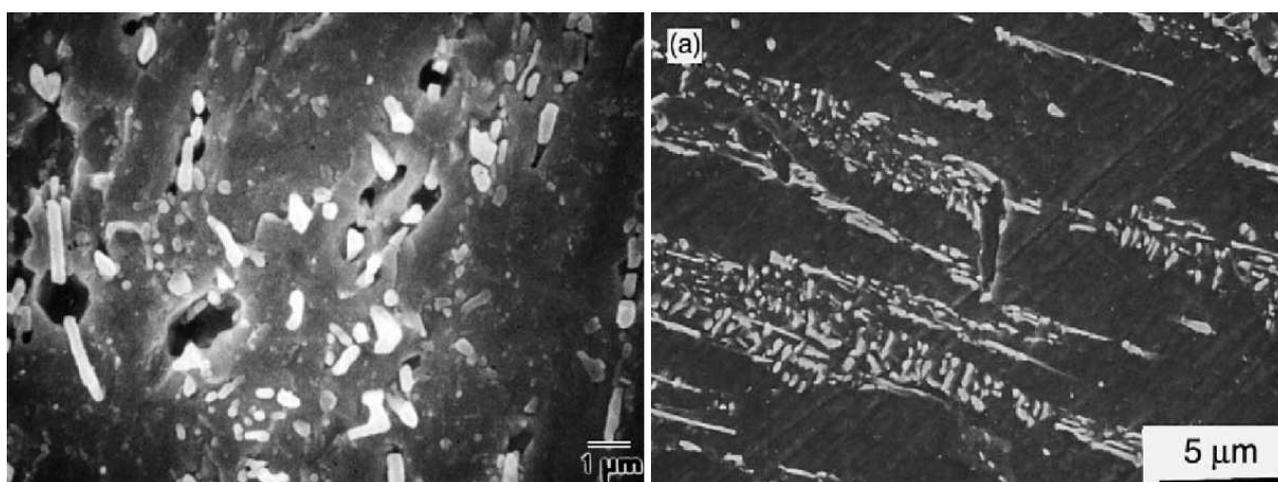


FIG. V.8 – Clichés pris avant rupture macroscopique d’initiation de clivage sur des alliages de composition proche du 16MND5, à -196°C . Mise en évidence de l’apparition de micro-défauts amorcés sur les carbures [Im et Lee, 2004].

Dans ses travaux, Hausild remet toutefois en cause la nocivité des amas de MnS [Hausild, 2002], au moyen d'un calcul EF : après avoir digitalisé la forme d'un amas de MnS, celui-ci effectue un calcul élastoplastique triaxié d'une cellule d'environ $2 \times 2 \times 2 \text{ mm}^3$, au centre de laquelle il place un défaut ellipsoïde de la même forme que l'amas. Il compare ensuite, en passant par l'approche locale de type Beremin, et pour un volume V_0 de $100 \times 100 \times 100 \text{ } \mu\text{m}^3$, la contrainte de Weibull et la probabilité de rupture cumulée au sens de Beremin de cette cellule avec celle d'une cellule ne contenant aucun défaut.

Les résultats montrent alors qu'au regard de ces critères, la cellule saine est plus "critique" que la cellule contenant un défaut : elle est plastifiée "totalement" plus tôt que la cellule avec défaut. Si l'on observe bien une zone "plus chargée" en terme de contrainte principale dans le plan du défaut et perpendiculairement à l'axe de plus grande sollicitation, celle-ci est "compensée" selon l'auteur par une zone "déchargée" au-dessus du défaut.

A une échelle plus fine, la rupture sur particules de secondes phases, et notamment sur les carbures est très souvent mise en avant, pour diverses microstructures bainitiques, comme phénomène déclencheur du clivage. Les travaux de [Hahn, 1984, Im et Lee, 2004] mettent en avant les carbures comme élément déclencheur du clivage pour des aciers de composition et de procédé d'obtention très proche de la bainite revenue de l'acier 16MND5 (figure V.8). On trouve aussi des observations sur d'autres types d'inclusions de seconde phase dans [Echeverria et Rodriguez-Ibabe, 2004], comme les nitrures de titane. La taille des carbures, et leur expulsion quasi systématique du lieu où s'est amorcée la rupture rend toutefois assez difficile l'interprétation sur faciès de rupture, y compris à l'aide de la technique EDX. On note toutefois que lors d'examens approfondis de faciès ne comportant pas de trace apparente de particule de seconde phase, on retrouve souvent des traces chimiques de la présence d'inclusions [Ortner et al., 2005].

b) Effets des différents paramètres : Chargements

Le Chargement mécanique : Si la plupart des travaux actuels amènent à considérer que la déformation plastique possède un rôle important dans la rupture par clivage (notamment au niveau de l'amorçage), il n'en reste pas moins que c'est bien sur la contrainte que l'on fixe des critères, pour les deux étapes de propagation et de franchissement des barrières.

Un autre aspect n'est que peu discuté d'une manière générale : l'effet de la nature multi-axiée du chargement sur le volume élémentaire. La plupart des modèles d'approche locale se basent sur une quantité, de forme proche de la contrainte de Weibull, elle-même fonction de l'intégrale de la plus grande contrainte principale sur un volume donné.

Il existe différentes formules pour quantifier la triaxialité χ , la plus commune étant celle qui fait le rapport de la pression hydrostatique p sur la contrainte équivalente de von Mises σ_{mises} :

$$\chi = \frac{p}{\sigma_{mises}} = \frac{tr(\underline{\sigma})}{3\sqrt{\frac{3}{2}\underline{\mathbf{s}}:\underline{\mathbf{s}}}} \quad (5.8)$$

Les calculs EF utilisés, par exemple pour caler les paramètres du modèle de Beremin, montrent par ailleurs clairement que les taux de triaxialité à considérer à proximité de l'amorçage du clivage des éprouvettes ne sont pas comparables à ceux des zones chargées uniaxialement.

Les travaux de Hang Ma [Ma, 1998] annoncent clairement dans leurs conclusions qu'une simple valeur de contrainte critique ne peut être considérée que comme un paramètre "apparent" pour l'initiation ou la propagation du clivage. Il propose par ailleurs de reprendre l'idée de Smith [Smith, 1966], qui prenait en compte la pression hydrostatique et la première contrainte principale dans ses travaux. Cette idée est aussi reprise dans les travaux de Roos [Roos et al., 2005], qui, en prenant en compte un "quotient de multiaxialité" sur une longueur donnée (de manière similaire à la considération d'une contrainte d'ouverture sur une longueur minimale pour le modèle RKR), prédit la rupture pour différentes géométries d'entailles, et pour différentes tailles d'éprouvettes.

A une échelle plus locale, l'effet de la triaxialité a aussi été étudié. Ainsi, l'effet de la triaxialité locale a été étudié à l'échelle de la rupture et de la décohésion des carbures [Kroon et Faleskog, 2005]. Les auteurs maillent un carbure de forme simplifiée (cylindrique) et une fissure avec des éléments finis de surface cohésive. Ils testent diverses formes (rapport hauteur/largeur) et diverses triaxialités, quantifiées par le rapport entre la contrainte circonférentielle et la contrainte axiale, leur maillage étant axisymétrique. Ils en concluent notamment qu'une forme oblongue pour les carbures réduit le diamètre nécessaire à leur rupture. Enfin, à l'inverse de ce que prédisent les modèles classiques, il semblerait qu'une augmentation du taux de triaxialité diminue le chargement "fibre-loading" sur les carbures oblongs, et augmente par ainsi la taille du carbure critique à même de casser.

A l'inverse, une fois une fissure présente dans le matériau, les travaux de [Beltz et Machová, 2004], rapprochent l'effet de la multiaxialité du chargement à l'émission de dislocations depuis la pointe de fissure à l'aide de simulations atomistiques. La multiaxialité du chargement aurait d'après ces travaux tendance à favoriser la rupture fragile par la propagation du clivage plutôt que l'émoussement.

La température : Le rôle de la température sur la rupture fragile est complexe, et encore mal compris, aussi bien dans son interprétation que pour sa description dans la modélisation. En effet, la température agit sur la plupart des phénomènes impliqués dans la rupture.

Premièrement, le comportement va dépendre de la température. Que ce soit macroscopiquement, puisque celle-ci régit les niveaux de contrainte atteints pour la structure, mais aussi, à l'échelle microscopique, au niveau des surcontraintes induites par les hétérogénéités de microstructure. Dans la plupart des modélisations, on traduit cela par

un changement des paramètres de la loi de comportement [Margolin et al., 1999, Yang et al., 2003, Tanguy et al., 2005]. Cet aspect, déjà complexe, est le plus trivial.

Par ailleurs, la température aura une influence sur les paramètres de rupture locaux : l'amorçage d'une micro-fissure sur un carbure ou toute autre entité cristallographique dépendra de la température. La dépendance en température de l'énergie d'ouverture de fissure, ou bien encore l'énergie de surface nécessaire pour propager la fissure dans la matrice ferritique, puis éventuellement au travers de barrières microstructurales tels que les joints de grains fortement désorientés, est encore mal connue. Lin a résumé la multiplicité des phénomènes [Lin et Evans, 1987] dans un diagramme présenté à la figure V.9. On y observe bien qu'il est difficile de décrire précisément quel phénomène régit la rupture fragile sur une large plage de température. On ajoutera par ailleurs que l'auteur ne signale pas certains phénomènes (franchissement des barrières, plasticité locale), pouvant encore compliquer la détermination d'un critère pertinent.

c) Effet des paramètres liés au matériau

La microstructure des aciers de cuve est complexe, l'interprétation de son influence sur la rupture aussi, puisqu'elle peut faire intervenir de nombreux paramètres dont la variation possède plusieurs conséquences. On pense notamment à la taille de grains, et aux tailles d'inclusions, directement dépendantes des traitements thermiques subis par l'acier et de sa composition. Bien que les aspects purement métallurgiques ne soient pas l'objet de cette étude, on pourra se reporter à divers travaux, concernant les microstructure bainitiques notamment [Bhadeshia et Honeycombe, 2006], ou bien encore la métallurgie des zones affectées thermiquement en soudure [Lambert-Perlade, 2001], qui partage de nombreux aspects communs avec le matériau de cette étude.

Si on a déjà bien décrit l'aspect statistique en terme de répartition "spatiale" du défaut nécessaire à la rupture, on s'aperçoit en s'intéressant aux aspects métallurgiques qu'il n'existe pas une seule taille de défaut susceptible de provoquer la rupture, et donc pas une seule contrainte critique de rupture fragile.

La taille de grains : Tout comme pour la température, l'effet de la taille de grains sur la rupture par clivage est multiple. Au niveau du comportement, et pour les tailles de grains ou de paquets considérées ici, c'est bien évidemment l'effet Hall-Petch qui permet de capter l'effet de la taille de grains sur le chargement local par l'intermédiaire de l'évolution de la limite d'élasticité.

Du point de vue des phénomènes de rupture, et en partant de la théorie de Smith d'une rupture amorcée sur les carbures, Curry et Knott [Curry et Knott, 1978] ne prédisent pas une dépendance directe de la contrainte critique d'amorçage à la taille de grains : ils concluent que cette dépendance a été à tort tirée des premières études cherchant à lier paramètres microstructuraux et rupture, et trouvent une raison à ce biais d'interprétation. Selon eux,

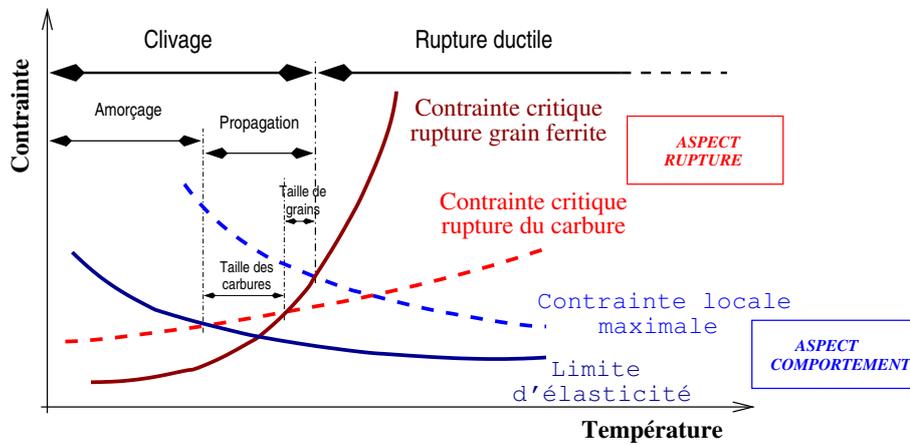


FIG. V.9 – Une représentation schématisée des divers mécanismes pouvant régir la rupture par clivage, d'après [Lin et Evans, 1987].

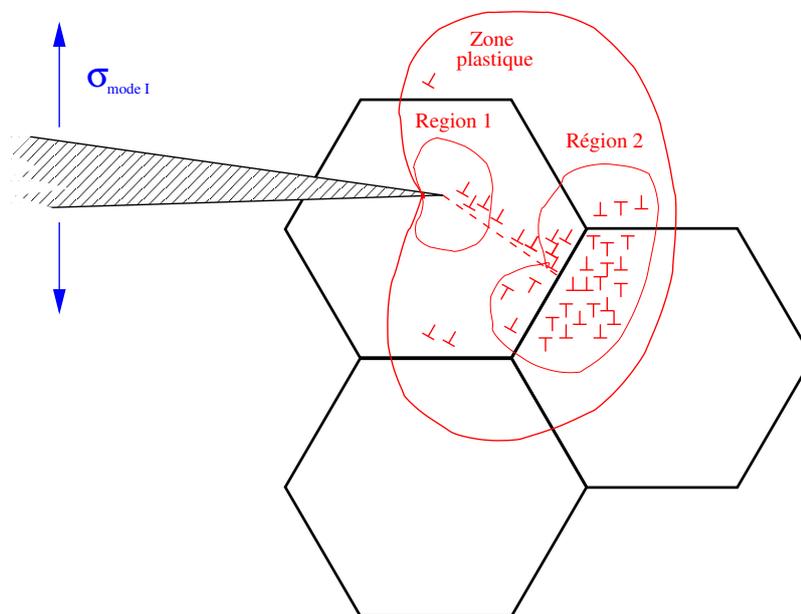


FIG. V.10 – L'influence de la taille de grains sur la résistance à la propagation du clivage, d'après [Katz et al., 1993]. Une faible taille de grains rapproche les régions 1 et 2, rendant plus difficile l'avancée de la fissure.

la distribution de taille de carbures, dépendante peu ou prou des mêmes paramètres d'élaboration thermomécaniques que la taille de grains serait en fait le paramètre pertinent.

On cite cette interprétation dans [Hahn, 1984], tout en rappelant que l'amorçage des fissures nécessite une certaine quantité de glissement plastique, et une augmentation de la contrainte locale, par un mécanisme d'empilement par exemple. Par ailleurs, cet aspect avait déjà été étudié ([Lindley et al., 1970]) et l'on démontre qu'en élastoplasticité, la sur-contrainte agissant sur les particules aux joints de grains dépend aussi de la taille de grains, ne serait-ce que par l'intermédiaire de l'effet Hall-Petch.

Dans cet esprit, on trouve aussi, par exemple dans les travaux de Lin *et al.* [Lin et Evans, 1987], plusieurs tentatives de dissocier l'influence des deux paramètres. En partant d'une même nuance d'acier AISI 1008 (Cr-Mn), les auteurs parviennent à faire varier indépendamment la taille de grains moyenne (en jouant sur le temps d'austénitisation), et la distribution de taille de carbures (en jouant sur le temps de revenu). Le résultat est qu'un raffinement de la taille de grains augmente la résilience du matériau, pour différentes géométries d'éprouvettes entaillées ou fissurées.

On trouvera dans [Katz et al., 1993] la même conclusion : on l'explique ici en supposant qu'une faible taille de grains, en diminuant la distance moyenne au front de fissure de clivage du joint de grains, et en augmentant le nombre de joints "s'oppose" à l'avancée du clivage, en créant une "contrainte de rappel" due aux empilements de dislocations émis par la fissure, et dus à la plasticité (figure V.10).

Pour les microstructures bainitiques à basses températures, le rôle de la taille de paquets de lattes est décrite, une fois de plus en termes de nombre d'interfaces à franchir pour propager une fissure [Zhang et Knott, 1999]. L'analyse faite par ailleurs dans ces travaux donne au franchissement des barrières microstructurales un rôle prépondérant dans la ténacité du matériau.

Le rôle de la taille de grains a été récemment décrit expérimentalement pour des aciers très proches du 16MND5 dans [Im et Lee, 2004, Yang et al., 2004, Kim et al., 2003, Echeverria et Rodriguez-Ibabe, 2003]. On y reprend des explications très similaires de l'influence de la taille de grains sur la ténacité, largement inspirées des travaux déjà cités.

La distribution de tailles de défauts : Le lien entre tailles de défauts et tailles de grains a été évoqué au chapitre précédent. La distribution de tailles de défauts peut être vue de deux façons, selon qu'on la prend explicitement en compte ou pas.

Ainsi, dans certains travaux majeurs sur l'approche locale, on postule un type de distribution de tailles de défauts [Beremin, 1983, Mudry, 1987], (voir V.2.3.b), mais si l'on s'en sert pour développer une théorie, on ne s'occupe à aucun moment de la quantifier ou de tenter de lui donner une signification ou une explication. Les hypothèses de Beremin postulent ainsi que ce sont les mécanismes de plasticité qui créent ces défauts sans pour autant préciser où ils s'amorcent, ni expliquer que pendant le chargement, on considère qu'il n'apparaît pas de nouveaux défauts.

On notera donc que la plupart des modèles d'approche locale déjà présentés et s'inspirant du modèle de Beremin remettent en question cette hypothèse tout en justifiant la présence de la distribution des micro-défauts au regard du cas particulier qu'ils ont à traiter (souvent lié au matériau et à la température).

Certains travaux essaient toutefois de mesurer expérimentalement et de rendre compte de la distribution de tailles des défauts dans leur formulation d'une probabilité de rupture [Lee et al., 2002, Tanguy et al., 2003, Ortner et al., 2005]. Rappelons dès lors que ce sont avant tout les queues de distributions statistiques qui ont un intérêt dans ce cas-là. En effet, si le but est de lier une contrainte critique aux tailles de défauts par un critère de type Griffith (équation 5.7), on comprend facilement que ce sont les plus grosses tailles de défauts, et donc une très faible proportion de ceux-ci qui pourront provoquer la rupture. Reste que les gros défauts doivent aussi être "très chargés" pour provoquer la rupture.

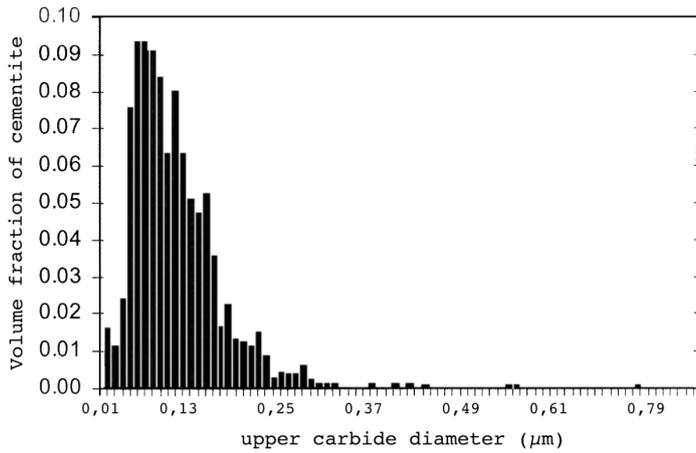
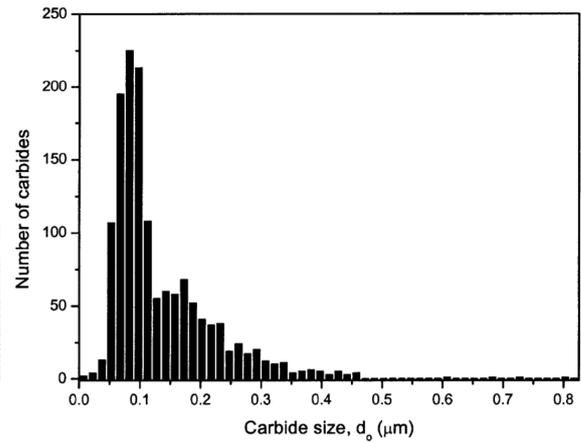
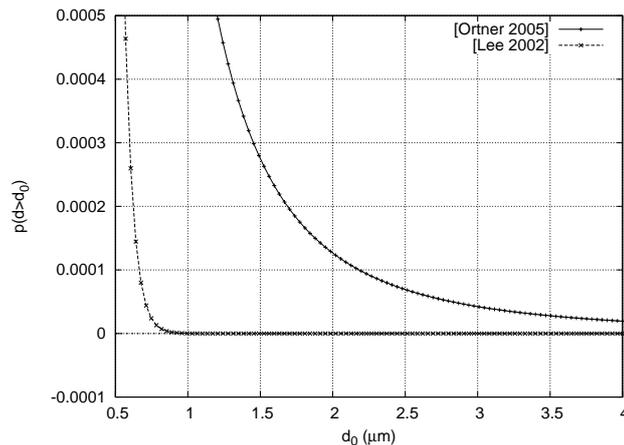
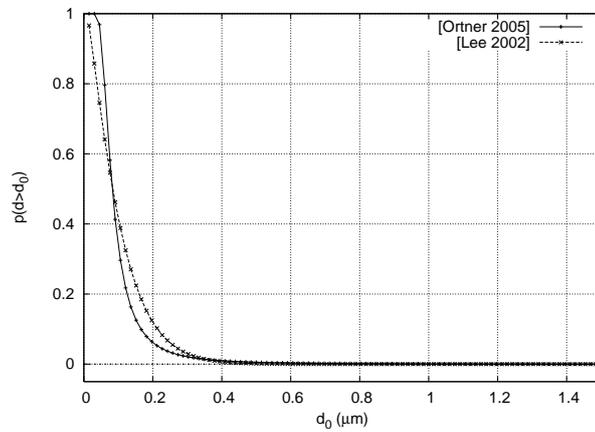
On notera que parmi d'autres travaux prenant en compte la distribution des carbures, nombreux sont ceux ne s'intéressant finalement qu'aux quantités statistiques habituelles (taille moyenne des carbures), bien qu'il existe certainement un lien entre taille moyenne et taille des plus gros carbures. Enfin, on peut noter que trop souvent, lorsque l'on se donne la peine de fournir une distribution statistique, on ne fournit pas les données pertinentes que sont le dénombrement des particules, et les valeurs extrémales déterminées.

On trouve dans la littérature plusieurs distributions de tailles de carbures pour l'acier A508 Cl.3, équivalent au 16MND5 [Ortner et al., 2005, Lee et al., 2002]. Ces différentes distributions sont présentées à la figure V.11. Notons que ces distributions ne sont pas toujours utilisées telles quelles, mais souvent représentées par une fonction statistique. Par ailleurs, on peut trouver des informations équivalentes pour un acier de composition et de traitement thermique très proche [Yang et al., 2004].

En observant les différents éléments de la figure V.11, on observe que les répartitions trouvées expérimentalement dans les deux travaux sont relativement proches (avec notamment une taille maximale de carbure mesurée relativement équivalente). Les lois de distribution statistiques utilisées pour modéliser ces distributions ont une allure "globale" relativement proche, mais lorsque l'on s'intéresse aux queues de ces distributions approximées qui seront, comme déjà évoqué, la seule partie vraiment significative, on s'aperçoit que les formulations choisies sont très différentes.

De manière relativement intuitive, on s'étonne que la distribution proposée dans [Ortner et al., 2005] donne une probabilité de trouver un carbure de taille supérieure à d_0 encore significative pour des tailles d_0 (par exemple $3 \mu\text{m}$) elles-mêmes bien supérieures à la taille maximale mesurée expérimentalement (bien qu'il soit mesuré une taille maximale de $0,72 \mu\text{m}$ et estimé une taille possible maximale de $2 \mu\text{m}$).

La formulation de la loi utilisée dans [Lee et al., 2002] est une loi introduisant un seuil. Par ailleurs, dans les travaux de [Ortner et al., 2005], on introduit, plus tard dans la démarche, un seuil de taille de carbures maximal pouvant provoquer le clivage, dont on fait une explication métallurgique qui n'est hélas pas appuyée expérimentalement : les carbures

[Ortner *et al.* 2005][Lee *et al.* 2002]

$$\text{Ortner : } p(d > d_0) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{d_0/2}{0.036}\right)^{-2.7}\right) (\mu\text{m})$$

$$\text{Lee : } p(d > d_0) = \exp\left(-\left(\frac{d_0-0.00917}{0.10158}\right)^{1.192}\right) (\mu\text{m})$$

FIG. V.11 – Distributions de tailles de carbures déterminées expérimentalement pour deux nuances d'acier de cuve (Euro 'A' et A508 Cl.3), d'après [Ortner *et al.*, 2005, Lee *et al.*, 2002]. Dans ces travaux, on approxime la distribution réelle par une fonction statistique. Celles-ci sont représentées et données ci-dessus (allure globale et queue de distribution).

de taille supérieure à d_{max} seraient cassés dès l'étape de mise en forme, pendant laquelle les défauts créés perdraient toute nocivité (par prédéformation plastique). Peut-être le choix d'une distribution statistique mieux adaptée aurait-elle évité d'avoir à éliminer des tirages les tailles de carbures qui par ailleurs n'existent pas dans la réalité.

Étape critique et dépendance en température : l'énergie de surface. Comme on l'a déjà vu, la plupart des travaux s'appuient sur le critère de Griffith pour modéliser les deux étapes de la propagation et du franchissement des barrières microstructurales. On pose ainsi respectivement soit la taille de défaut comme diamètre de fissure à propager, soit la taille de grain ou de paquet. Si l'on reprend l'équation 5.7, on se rend compte qu'il ne reste dès lors qu'une seule donnée inconnue pour appliquer le critère de Griffith : l'énergie équivalente de surface.

On rappelle que ce paramètre imprécis permet bien souvent de rendre compte des divers phénomènes favorisant ou empêchant la rupture par clivage, tout en s'affranchissant de leur description.

On ne pourra pas non plus s'affranchir de remarquer que c'est bien le couple [dimensions de défauts - énergie de surface associée] qui est important, et qui détermine par ailleurs la valeur de contrainte à même de provoquer le clivage selon ce critère. Par ailleurs, Si les distributions de tailles de carbures sont relativement difficiles à obtenir, les techniques d'analyses d'image, couplées à l'EBSD renseignent facilement sur les distributions de taille de grains ou de paquets bainitiques.

Les valeurs d'énergie de surface équivalentes sont plus difficiles à déterminer. Que ce soit pour propager une fissure initiée autour d'un carbure ou pour qu'une fissure de clivage passe l'obstacle des joints de grains, on utilise quasiment toujours la modélisation de Griffith ou une formulation dérivée en mécanique des milieux continus.

Concernant les barrières microstructurales, on trouvera quelques valeurs dans la littérature. Ces valeurs de γ_p^{joints} sont la plupart du temps obtenues par approche inverse, soit en passant par l'approche locale et en s'assurant que ce sont bien ces barrières qui commandent la rupture, soit par d'autres moyens expérimentaux visant à mesurer spécifiquement l'énergie nécessaire au franchissement d'un joint de grain.

On trouve dans [Hahn, 1984] une valeur estimée grossièrement à 100 J.m^{-2} qui correspond au passage des joints pour un acier faiblement allié. Zhang [Zhang et Knott, 1999] cite plusieurs travaux arrivant à une valeur d'environ 120 J.m^{-2} pour un acier A533B très proche du 16MND5. Cette valeur est reprise dans [Yang et al., 2004]. Seuls les travaux de Qiao et Argon [Qiao et Argon, 2003a, Qiao et Argon, 2003b] donnent des valeurs bien plus élevées, mais pour un acier fer-silicium différent de l'acier 16MND5. Effectuant un prélèvement sur des échantillons à très grosse taille de grain, ils sont parvenus à déterminer expérimentalement des valeurs comprises entre 230 et 850 J.m^{-2} . Toutes ces valeurs sont valables à basse température (aux alentours de -100°C).

En ce qui concerne la propagation d'un défaut au sein même de la matrice ferritique, les valeurs rencontrées sont là aussi plutôt dispersées. Si l'on commence à obtenir des valeurs pour l'énergie de surface pure γ_s d'environ $2,25 \text{ J.m}^{-2}$ (qui correspond au clivage sans aucune plasticité en point de fissure) à l'aide de simulations atomistiques [Blonski et Kiejna, 2004], on ne peut pas décrire l'ensemble des mécanismes participant à l'énergie équivalente (rivières de clivage, rôle des atomes en solution, de la plasticité...). Le critère utilisé est parfois exprimé en termes d'énergie nécessaire pour franchir l'interface carbure/matrice.

La question de la dépendance en température reste posée. La plupart des travaux considèrent des valeurs d'énergie équivalente pour la propagation dans la ferrite γ_p^α constante à basse température (en dessous de -60°C). On reprend dans [Zhang et Knott, 1999, Yang et al., 2004, Kroon et Faleskog, 2005] là encore la valeur de 14 J.m^{-2} évoquée par [Hahn, 1984]. On trouve dans [Im et Lee, 2004] une valeur déterminée de $12,4 \text{ J.m}^{-2}$ à -196°C pour un acier 16MND5. Enfin les travaux de [Ortner et al., 2005] utilisent une valeur de 7 J.m^{-2} .

On remarquera tout de même que, l'énergie équivalente faisant intervenir l'émission de dislocations en pointe de fissure, il semble difficile de la considérer complètement indépendante de la température. Ainsi, Wallin [Wallin et al., 1984] propose donc de partager classiquement γ_p^α en deux termes :

$$\gamma_p^\alpha = \gamma_s + w_p \quad (5.9)$$

où, γ_s serait la composante athermique évoquée plus haut, et w_p la composante liée aux mécanismes de plasticité. Selon Wallin, il semble logique de lier ce travail à la mobilité des dislocations, et il propose de rendre ce travail proportionnel à la force de Peierls-Nabarro, comme déjà vu à l'équation 5.38.

Une approche inverse lui permet d'exprimer les paramètres de cette équation pour un acier bainitique proche de l'acier de cuve :

$$\gamma_p^\alpha = 2,15 + 1,77 \cdot e^{0,0104 \cdot T} \quad (5.10)$$

Cette fonction est tracée à la figure V.12, ainsi que d'autres valeurs couramment évoquées.

Dans ses travaux, Haušild [Hausild, 2002] détermine, en détectant la position du site d'amorçage, et en la faisant correspondre au niveau de contrainte calculé par EF, une contrainte critique de clivage de 1750 MPa. Cela le conduit à une valeur d'énergie de surface γ_{eff} de $8,9 \text{ J.m}^{-2}$, en considérant le critère de Griffith évoqué à l'équation 5.7, et une taille de défaut (diamètre) de $2 \mu\text{m}$. Cette valeur reste proche des valeurs évoquées jusqu'ici. Haušild constate toutefois que ces valeurs sont très dépendantes de la modélisation éléments finis, et qu'il est probable que les valeurs locales et réelles de contraintes soient plus élevées.

On a tracé en figure V.13 les contraintes de Griffith nécessaires à la propagation d'un défaut pour de larges plages de valeurs admissibles d'énergie de surface et de taille de

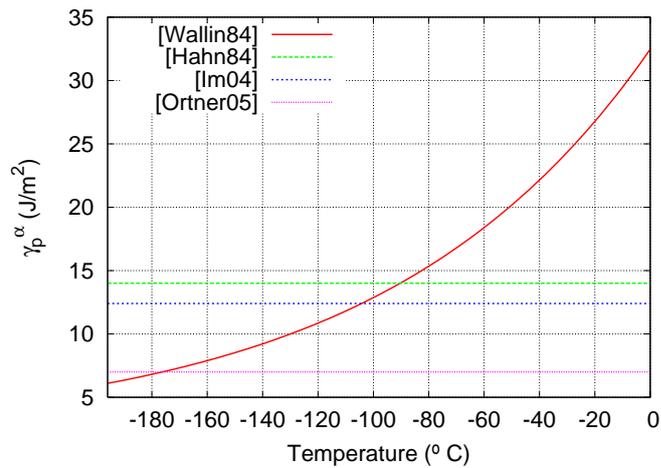


FIG. V.12 – Différentes valeurs d'énergie de surface équivalente pour la propagation d'un défaut amorcé sur une particule pour l'acier de cuve 16MND5 ou des nuances proches.

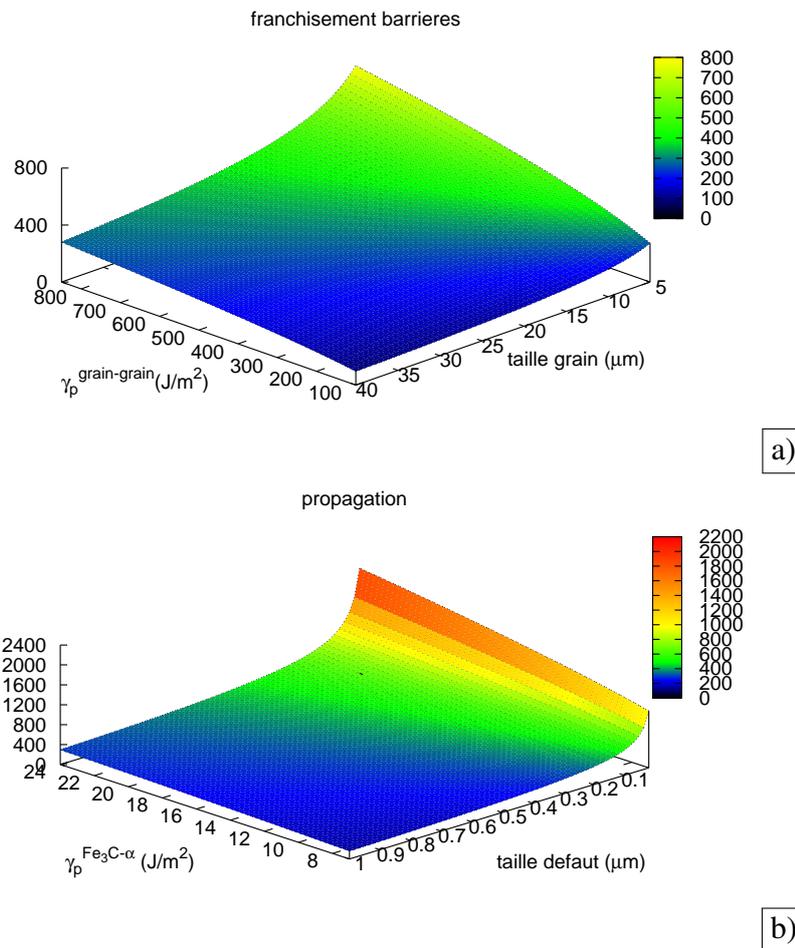


FIG. V.13 – Tracé de la contrainte de Griffith pour l'avancée d'une fissure penny-shape dans le cas : a) du franchissement des barrières microstructurales (joints de paquets) et b) de la propagation d'un défaut amorcé sur les carbures.

défauts à propager. Si comme toujours, c'est aux valeurs extrêmes qu'il faut s'intéresser, on remarque tout de même que dans la plupart des cas la contrainte nécessaire pour propager un défaut est plus élevée que celle nécessaire pour franchir les barrières microstructurales.

Si cela n'était pas le cas dans les structures affectées thermiquement étudiées dans [Lambert-Perlade, 2001], c'est parce que les tailles de paquet bainitiques des microstructures étudiées étaient bien plus faibles que celles des aciers de cuve, nécessitant l'utilisation d'un modèle de rupture à deux événements déclencheurs. Bien évidemment on doit pouvoir trouver des cas particuliers où la propagation nécessite une contrainte plus forte que l'amorçage dans l'acier de cuve, mais nous ferons ici l'hypothèse que ce cas est très largement minoritaire.

Cette réflexion nous amène à considérer que, pour le cas particulier de l'acier de cuve aux basses températures, c'est bien l'étape de propagation du défaut dans la matrice ferritique environnante qui constitue l'étape critique pour propager le clivage, ce qui est par ailleurs une idée relativement répandue actuellement [Odette et al., 2003, Kroon et Faleskog, 2005, Bordet et al., 2005].

V.2.3 Modélisations de la rupture par clivage, les approches statistiques

a) Modélisation RKR

Richie, Knott et Rice [Ritchie et al., 1973] ont introduit la première modélisation qui relie la contrainte à proximité d'un défaut à la rupture instable. Ils postulent que la rupture a lieu lorsque la contrainte en pointe de fissure atteint la valeur critique σ_c sur une distance caractéristique du matériau X_c (figure V.14). Ils utilisent pour cela le champ de contrainte calculé par éléments finis en pointe de fissure par Hutchinson, Rice et Rosenberg (champ H.R.R.) [Rice et Tracey, 1973] :

$$\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_y} = g_{ij}(\theta) f\left(\frac{r}{(K/\sigma_y)^2}\right) \quad (5.11)$$

où σ_y est la limite d'élasticité, r et θ les coordonnées polaires en pointe de fissure, g_{ij} et f des fonctions dépendantes du matériau et de son écrouissage, et K le facteur d'intensité de contraintes.

Cette relation démontre une certaine validité pour l'acier qu'ils considèrent, et leur permet de lier la distance critique à la taille de grains. Par la suite plusieurs travaux [Curry et Knott, 1978] montreront les limites de cette hypothèse. Curry et Knott [Curry et Knott, 1979] ont fourni une explication statistique à la distance critique postulée par le modèle RKR. Ils concluent que le volume fini de matériau se trouvant en tête de fissure doit être suffisamment grand pour contenir un défaut susceptible d'amorcer le clivage. Ils remarquent que cela dépend non seulement du matériau, et de sa teneur en défauts, mais aussi de la probabilité de trouver ce défaut dans ce volume donné. On trouve là les premières explications à la forte dispersion des comportements à rupture de différents échantillons d'un même matériau testé dans les mêmes conditions. Si dans un échantillon, un défaut

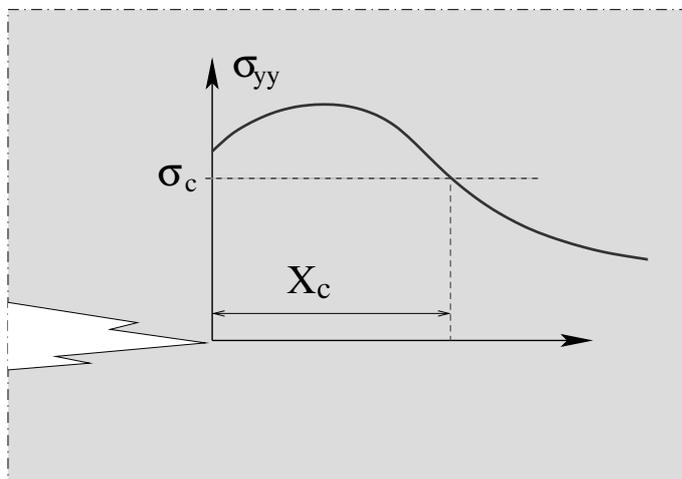


FIG. V.14 – Représentation schématique du modèle RKR. [Ritchie et al., 1973].

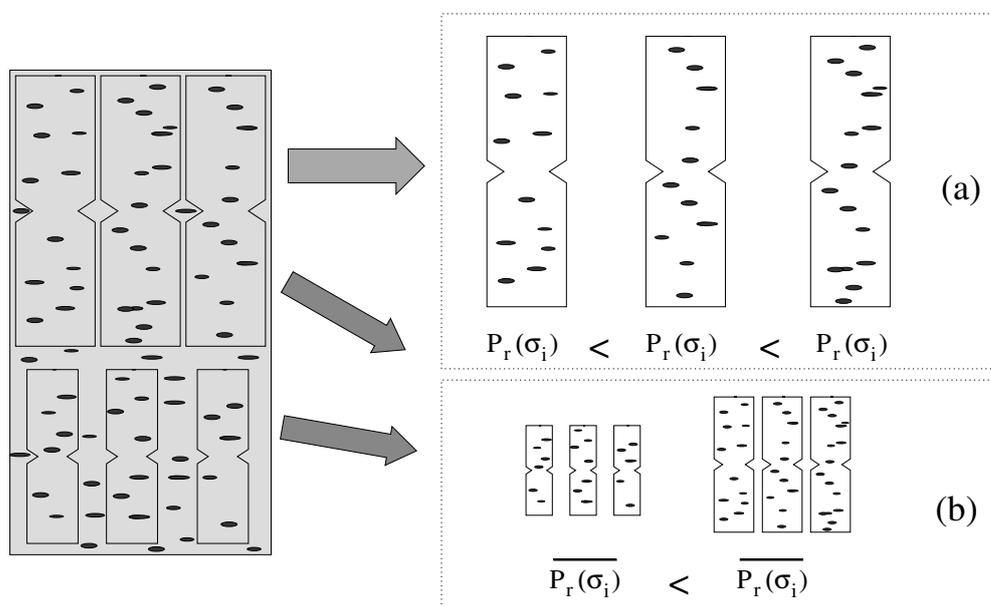


FIG. V.15 – Illustration des deux explications (a) Effet de dispersion dans une famille d'échantillons identiques, (b) Effet du volume sollicité sur la ténacité moyenne d'une famille d'échantillons.

suffisant à amorcer la rupture se situe à proximité de la pointe de fissure ou d'entaille, alors qu'il est plus éloigné dans un autre échantillon, sa résistance à la rupture sera moindre. Ainsi, ce sont les premiers travaux à faire état d'un besoin du traitement de la rupture par clivage par une approche statistique.

b) Approches statistiques de la rupture par clivage

La théorie du maillon le plus faible :

Les deux faits que la ténacité d'échantillons identiques soit aussi dispersée dans le régime fragile et que la ténacité moyenne soit plus élevée pour un échantillon du même matériau de taille inférieure ont rapidement conduit à adopter la théorie du maillon le plus faible. Dans cette théorie, la structure considérée est divisée en volumes élémentaires, parfaitement indépendants du point de vue de la rupture, tels que la rupture complète d'un de ces éléments entraînera la rupture de la structure complète. Les deux effets évoqués précédemment trouvent alors une explication simple. La dispersion des ténacités pour une même géométrie s'explique par le fait que le volume contenant le défaut amorçant la rupture fragile peut être placé soit dans une zone fortement chargée dès le départ, soit dans une zone moins brutalement chargée. Pour ce qui est de l'effet de taille, il apparaît simplement qu'une famille d'échantillons plus gros a une zone fortement chargée plus grande dans laquelle on a plus de chance de trouver des défauts critiques que dans celles de petites éprouvettes (figure V.15).

Si l'idée sous-jacente de fragilité et de rupture brutale est bien prise en compte, la notion d'indépendance des volumes élémentaires est *a priori* discutable. Elle indique, par exemple qu'un volume ayant clivé et créé une fissure n'aura pas d'influence sur la rupture des autres volumes élémentaires. Cette hypothèse ne peut être validée que pour un volume suffisamment grand, en tout cas à une plus grande échelle que celle du grain.

On divise alors la structure sollicitée en N volumes V_0 . Chacun des volumes est soumis à un état de contrainte homogène σ_i , qui représente la contrainte principale maximale. On associe à chacun de ces volumes une probabilité de rupture cumulée $p_0(\sigma > \sigma_i)$, et donc une probabilité de survie de $1 - p_0(\sigma_i)$. En respectant l'hypothèse précédente, et pour V suffisamment grand devant V_0 , la probabilité de rupture du volume complet s'écrit :

$$P_r(\sigma) = 1 - \prod_{i=1, N} (1 - p_0(\sigma_i)) \quad (5.12)$$

soit :

$$P_r(\sigma) = 1 - \exp \left[- \int_V \ln \left(\frac{1}{1 - p_0(\sigma_i)} \right) \cdot \frac{dV}{V_0} \right] \quad (5.13)$$

Distribution de Weibull :

La distribution de la probabilité de rupture a été proposée de manière empirique [Weibull, 1951] :

$$\ln\left(\frac{1}{1-p_0(\sigma_i)}\right) = \left(\frac{\langle \sigma_i - \sigma_0 \rangle}{\sigma_u}\right)^m \quad (5.14)$$

avec $\langle x \rangle = x$ pour $x > 0$, $\langle x \rangle = 0$ pour $x \leq 0$

σ_0 représente donc une contrainte seuil, σ_u une contrainte de normalisation, et m le module de Weibull. La relation 5.13 devient :

$$P_r(\sigma) = 1 - \exp\left[-\int_V \left(\frac{\langle \sigma_i - \sigma_0 \rangle}{\sigma_u}\right)^m \cdot \frac{dV}{V_0}\right] \quad (5.15)$$

La plupart des modèles de rupture par clivage des aciers proposés par la suite considère alors que le mécanisme critique est la propagation d'une micro-fissure amorcée sur un défaut à la matrice adjacente. Les défauts seront soit des particules fragiles, soit des micro-fissures, mais toujours distribuées de manière aléatoire, la distribution des tailles devant être connue par ailleurs. Les différences se situent ensuite au niveau des phases critiques considérées, que ce soit l'amorce de rupture ou la propagation, ou bien encore les deux.

Le modèle de Beremin :

Ce modèle développé par le groupe de travail Beremin [Beremin, 1983], est destiné à la modélisation de la rupture par clivage à basse température des aciers bainitiques de type 16MND5. On considère la probabilité de rupture cumulée d'une structure soumise à une histoire de sollicitation. Le mécanisme considéré comme critique est la propagation d'une fissure de clivage, elle-même considérée comme amorcée par les mécanismes de la plasticité. Le modèle s'appuie sur plusieurs hypothèses qui ont été récapitulées dans [Tanguy, 2001] :

- (H1) On suppose que les **mécanismes de plasticité** amènent, dès leur mise en place, l'apparition d'une distribution de micro-défauts dont **le nombre n'augmente plus au cours de l'histoire des sollicitations**.
- (H2) Un défaut est considéré comme instable selon le **critère de Griffith**. (5.7)
- (H3) Seule la **contrainte principale maximale** σ_I intervient dans la propagation du défaut, les défauts étant alors considérés comme orientés perpendiculairement à la direction principale.
- (H4) La division du volume représentatif V soumis à un champ de contrainte hétérogène se fait selon N volumes V_u soumis à un champ de contrainte homogène. V_u doit alors être **le plus petit volume unitaire pour lequel l'indépendance statistique est vérifiée, mais assez grand pour que la probabilité d'y trouver un défaut de taille suffisante ne soit pas faible**.
- (H5) La théorie du **maillon le plus faible** est appliquée.
- (H6) La rupture va s'initier à partir des **défauts les plus importants**, seule la connaissance de la distribution des ces derniers est nécessaire. On pose alors $p(a)da$

la probabilité qu'un défaut de longueur comprise entre a et $a + da$ soit présent dans le volume V_u . On suppose $p(a)$ de la forme (cf. figure V.16) :

$$p(a) = \frac{\alpha}{a^\beta} \quad (5.16)$$

En posant :

$$k = \sqrt{\frac{E \cdot \gamma_{eff}}{\pi(1-\nu^2)}} \quad (5.17)$$

il vient comme définition de la probabilité de non rupture p_{nR} d'un volume unitaire V_u soumis au champ de contrainte σ_I^i :

$$p_{nR}(\sigma_I^i) = \int_0^{(\frac{k}{\sigma_I^i})^2} p(a) da \quad (5.18)$$

On peut alors définir la probabilité de non rupture P_{nR} du volume complet V soumis à la contrainte σ_I , et dont les volumes élémentaires sont soumis à la contrainte σ_I^i comme étant :

$$P_{nR}(V, \sigma_I) = \prod_{i=1,n} p_{nR}(\sigma_I^i) \quad (5.19)$$

La probabilité $p_R(\sigma_I^i)$ de rupture d'un volume unitaire V_u étant petite, on peut écrire :

$$\ln(P_{nR}(V, \sigma_I)) = \ln\left(\prod_{i=1,n} p_{nR}(\sigma_I^i)\right) = \sum_{i=1,n} \ln(1 - p_R(\sigma_I^i)) \simeq \sum_{i=1,n} -p_R(\sigma_I^i) \quad (5.20)$$

En considérant que le volume V est soumis à une contrainte σ_I homogène, il vient :

$$P_{nR}(V, \sigma_I) = \exp\left(\sum_{i=1,n} -p_R(\sigma_I)\right) = \exp\left(-n \cdot p_R(\sigma_I)\right) = \exp\left(-\frac{V}{V_u} \cdot p_R(\sigma_I)\right) \quad (5.21)$$

On pose :

$$m = 2\beta - 2 \quad (5.22)$$

et

$$\sigma_u = \left(\frac{m}{2\alpha}\right)^{\frac{1}{m}} \cdot \sqrt{\frac{E\gamma_R}{\pi(1-\nu^2)a}} \quad (5.23)$$

Pour une répartition des contraintes non homogène, en ne considérant que le volume plastique V_{plas} , en reprenant la distribution de Weibull (5.14), et en y éliminant la contrainte seuil σ_c on obtient :

$$P_{nR}(V, \sigma_I) = \exp\left[-\sum_{V_{plas}} \left(\frac{\sigma_I^i}{\sigma_u}\right)^m \frac{V_i}{V_u}\right] \quad (5.24)$$

soit une probabilité de rupture :

$$P_R(V, \sigma_I) = 1 - \exp \left[- \sum_{V_{plas}} \left(\frac{\sigma_I^i}{\sigma_u} \right)^m \frac{V_i}{V_u} \right] \quad (5.25)$$

où V_i représente un volume effectif, soit le volume de matière chargé à la contrainte maximale σ_I^i . On introduit alors la notion de contrainte de Weibull σ_w :

$$\sigma_w = \left[- \sum_{V_{plas}} \left(\sigma_I^i \right)^m \frac{V_i}{V_u} \right]^{\frac{1}{m}} \quad (5.26)$$

σ_w est assimilée au moment d'ordre m de la plus grande contrainte principale [Lambert-Perlade, 2001]. Elle est en pratique calculée par éléments finis. La probabilité de rupture s'écrit alors :

$$P_R = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right] \quad (5.27)$$

m représente la dispersion de la taille de défaut. Lorsque m (i.e. β) est grand soit pour une faible dispersion des tailles, l'effet de la taille du volume sollicité est faible, et c'est la contrainte principale qui joue un rôle important. A l'inverse, pour m faible, le volume sollicité devient le facteur prépondérant, et l'on retrouve les effets de taille décrits précédemment.

V_u devra inclure un certain nombre de grains, afin notamment de respecter l'hypothèse H4. Par ailleurs, la variation de σ_I sur ce volume ne doit pas être trop importante, ce qui amène à un volume représentatif de l'ordre de la dizaine de grain.

σ_u est un paramètre matériau considéré comme indépendant de la température.

Parallèlement à cette étude statistique, la contrainte de Weibull a été calculée par éléments finis dans le cas de nombreux essais à basse température sur plusieurs aciers bainitiques comparables au 16MND5. La probabilité de rupture (5.27) a ensuite été identifiée à la probabilité cumulée de rupture expérimentale (figure V.17) afin de déterminer les paramètres suivants :

- V_u contient environ 8 grains ($50 \times 50 \times 50 \mu m^3$),
- $m = 22$,
- $\sigma_u \simeq 2600 MPa$.

Le modèle de Beremin ainsi établi a été appliqué par la suite à divers cas exposés ci-après.

Correction de la déformation plastique pour le modèle de Beremin :

Dans les travaux indiqués précédemment [Beremin, 1983], les auteurs remarquent qu'une pré-déformation plastique à température ambiante, ou une modification de la géométrie des éprouvettes visant à augmenter la déformation précédant la rupture rend plus difficile l'apparition du clivage. Plusieurs raisons sont évoquées par les auteurs et notamment la réduction de la taille de grains apparente avec les fortes déformations. Cet

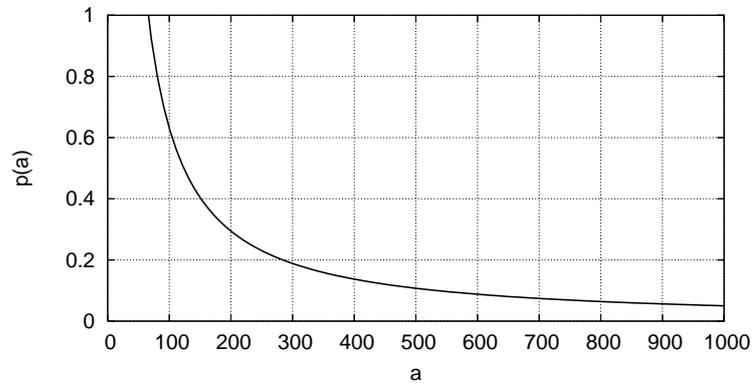


FIG. V.16 – Représentation de la densité de probabilité $p(a) = \frac{\alpha}{a^\beta}$ postulée dans le modèle de Beremin, pour $\alpha = 1000$ et $\beta = 1,1$.

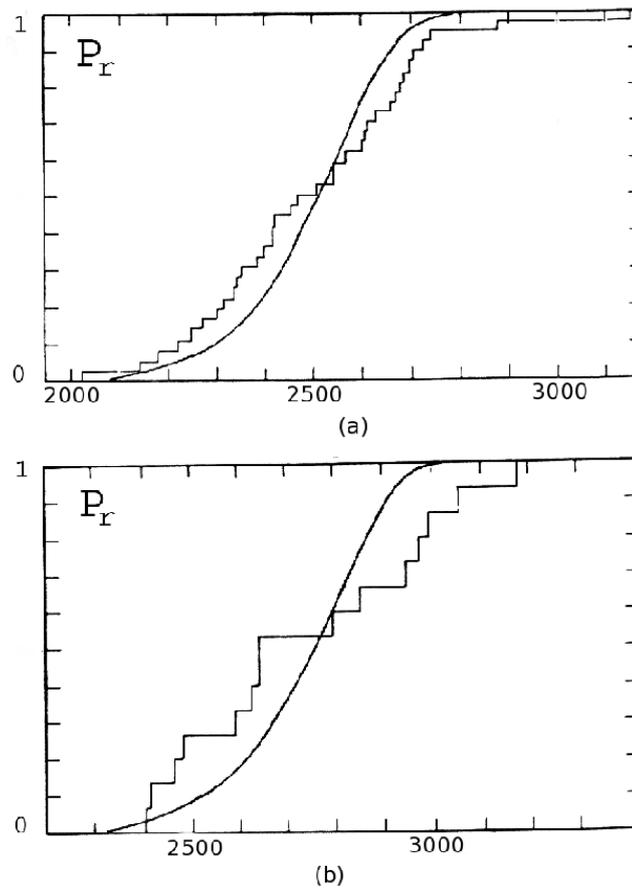


FIG. V.17 – Identification des paramètres du modèle de Weibull pour deux nuances d'acier faiblement allié (a) $\sigma_u = 2560$ MPa, et (b) $\sigma_u = 2800$ MPa [Beremin, 1983].

aspect est confirmé par les propriétés anisotropes vis-à-vis de la rupture d'échantillons fortement pré-déformés en compression. Au-delà de ces considérations géométriques sur la morphologie du polycristal, on pourrait ajouter qu'il est probable qu'une pré-déformation aux températures plus élevées que celles du clivage puissent entraîner un émoussement des micro-défauts déjà présents dans le matériau.

Une correction de la contrainte de Weibull est alors proposée, fonction de la déformation plastique selon la direction principale ϵ_I^p :

$$\sigma_w = \left[- \sum_{V_{plas}} \left(\sigma_I^i \right)^m \cdot \exp \left(- \frac{m \epsilon_I^p}{k} \right) \frac{V_i}{V_u} \right]^{\frac{1}{m}} \quad (5.28)$$

Application du modèle de Beremin au problème de la géométrie fissurée :

Pour un chargement symétrique en mode I, la distribution des contraintes en pointe de fissure est connue (champ HRR, équation 5.11) : $\sigma_{ij} = \sigma_y \cdot g_{ij}(\theta) f \left(\frac{r}{(K/\sigma_y)^2} \right)$.

Le problème qui se pose pour appliquer l'approche de Beremin tient aux forts gradients de contrainte en pointe de fissure. Pineau *et al.* [Beremin, 1983] calculent, dans le cas des aciers faiblement alliés évoqués précédemment, et en donnant par ailleurs des valeurs communes aux paramètres mécaniques ($K_{IC} = 30 \text{MPa}\sqrt{m}$, et $\sigma_y = 900 \text{MPa}$ à 77K), que la contrainte principale maximale peut varier de 2700 à 1800 MPa sur une distance équivalente à la taille de grains.

La définition d'un volume élémentaire respectant les hypothèses précédemment évoquées semble difficile. Cette difficulté est surmontée en considérant que l'hypothèse d'homogénéité du champ de contrainte est valable à une distance de la pointe de fissure équivalente à deux fois la taille de grains. Dès lors, une taille de volume élémentaire V_u qui doit être utilisée pour les analyses en pointe de fissure est définie à $50 \mu m$. On peut alors écrire :

$$P_R = 1 - \exp \left[- \frac{K^4 \cdot B_f \cdot \sigma_Y^{m-4} \cdot C_m}{\sigma_u^m \cdot V_u} \right] \quad (5.29)$$

où B_f est la longueur du front de fissure (souvent reliée à l'épaisseur de l'éprouvette), et C_m une constante numérique. On retrouve au travers de cette expression plusieurs effets observés expérimentalement [Lambert-Perlade, 2001]. En prenant :

- $K_{IC}^4 \cdot B_f = Cte$, on peut démontrer l'effet de taille de l'éprouvette.
- $K_{IC}^4 \cdot \sigma^{m-4} = Cte$, on peut démontrer que la variation de la ténacité selon la température ou le taux d'irradiation est reliée à une évolution de la loi de comportement plutôt qu'à une variation des paramètres de clivage. Cette constatation est en accord avec les conclusions tirées des travaux RKR. [Ritchie et al., 1973].
- σ_y dépendant de $\dot{\epsilon}$ permet d'exprimer l'effet de la vitesse de déformation.
- Le calcul de $\frac{K_{IC}(P_R=0,9)}{K_{IC}(P_R=0,1)} \simeq 2,1$ pour un acier de cuve montre l'aspect statistique de la dispersion.

Validité du modèle de Beremin dans le cas de la description de la rupture de l'acier de cuve :

Rossol [Rossol, 1998] a travaillé sur l'utilisation du modèle de Beremin pour décrire la rupture de l'acier de cuve. Ses conclusions sont que chaque combinaison d'une géométrie et d'une température d'essai peut mener à un jeu de paramètres différents. La contrainte de Weibull, notamment peut varier de manière significative.

Dès l'entrée dans la transition, la déviation des paramètres du modèle de Beremin pousse l'auteur à introduire une contrainte effective, tentant de prendre en compte l'élévation de contrainte dans la matrice due la présence de micro-fissures. Les résultats bien qu'encourageants pour certains types d'éprouvettes ne sont toujours pas satisfaisants.

Haušild [Hausild, 2002, Hausild et al., 2005], pour sa part, introduit une dépendance en température des deux paramètres du modèle de Beremin, et réintroduit la contrainte seuil qui avait été écartée de l'approche de Weibull utilisée par le groupe Beremin. La probabilité de rupture devient alors :

$$P_R = (V, \sigma_I, T) = 1 - \exp \left[- \sum_{V_{plas}} \left(\frac{\langle \sigma_I^i - \sigma_C \rangle}{\sigma_u(T)} \right)^{m(T)} \frac{V_i}{V_u} \right] \quad (5.30)$$

Pour le jeu de paramètres suivant :

- $\sigma_u(T) = 165750 \cdot \exp(0,0464 \cdot T)$
- $m(T) = 0,33 \cdot \exp\left(\frac{4442,3}{T+273,13}\right)$
- $\sigma_C = 1400MPa$

Haušild obtient des résultats satisfaisants pour dans la transition fragile-ductile (cf figure V.18). Les auteurs notent toutefois que la dépendance seule de σ_u à la température suffit à améliorer les qualités prédictives du modèle. Si la rupture fragile est traitée par l'approche de Beremin, on notera toutefois que l'endommagement ductile, présent pour les températures d'étude qui atteignent $-30^\circ C$, est pris en compte dans la modélisation du comportement.

La dépendance des paramètres du modèle en température est interprétée comme une variation de la résistance à la rupture locale due à l'apparition de barrières à la propagation différentes en fonction de la température sans toutefois qu'aucun résultat expérimental n'appuie cette interprétation.

Une extension au cas de la rupture de l'acier de cuve, le modèle MnS :

En se basant sur l'observation des sites contenant l'amorce de rupture par clivage pour un acier 16MND5 testé à très basses températures, Renevey [Renevey, 1998] confirme la présence par ailleurs déjà observée d'amas de sulfures de manganèse, notamment pour des éprouvettes lisses (les éprouvettes entaillées ayant bien évidemment tendance à rompre à proximité de l'entaille, qu'un amas s'y trouve ou pas) . Une démarche similaire à celle de Beremin est alors proposée, ne prenant non plus les défauts dus à la plasticité comme amorce de la rupture, mais plutôt l'endommagement ductile autour des amas de sulfures, qui est

assimilé à un défaut circulaire de type "penny-shape". Dans ce modèle, les deux paramètres sont V_0 et $\bar{\sigma}_c$. V_0 est par analogie avec le modèle de Beremin un volume élémentaire, défini ici par la distance moyenne entre amas de sulfures. La contrainte $\bar{\sigma}_c$ est quant à elle identifiée sur le comportement à rupture du matériau.

Le modèle montre cependant les mêmes limites que le modèle de Beremin puisqu'il ne permet pas de décrire tous les cas de figure de la rupture (jeux de paramètres toujours dépendants de la température ou de la géométrie) notamment en début de transition, et malgré une prise en compte de correction plastique. Renevey indique d'ailleurs une piste à suivre en suggérant une bi-modalité des sites de rupture à prendre en compte dans une approche probabiliste (amas de sulfures et défauts dus à la plasticité). Les travaux de Carassou [Carassou, 1999] complètent cette approche pour arriver à des conclusions relativement similaires. Haušild [Hausild et al., 2005] propose aussi l'établissement d'une loi bi-modale, tout en remarquant que le nombre de paramètres à identifier et surtout leur manque de signification physique rendrait cette démarche complexe.

Tous ces travaux insistent sur le fait que des mécanismes locaux au niveau de la plasticité et du clivage sont mis en jeu, et que les lois de comportement homogènes qui sont utilisées deviennent insuffisantes dans cette optique. Haušild *et al.* évoquent les "inhomogénéités" locales, qui apparaissent avec l'augmentation de la température. Elles ont un effet selon les auteurs sur le clivage, ou sur la localisation pendant la déformation ductile.

Le modèle de Bordet : Bordet *et al.* [Bordet et al., 2005] établissent un critère statistique de rupture par clivage. Les auteurs commencent par analyser les hypothèses du modèle de Beremin afin d'en discuter les faiblesses limitant sa portée.

Ils remarquent que différents facteurs de forme m peuvent être obtenus pour le même matériau selon la géométrie des éprouvettes. Par ailleurs, la procédure de calibration des paramètres m et σ_u leur paraît souvent mal employée. Le calcul de la contrainte de Weibull σ_w , qui permet de déterminer m dépendant lui-même de m , la procédure peut diverger.

Ils proposent donc une nouvelle approche. Tout d'abord, ils remettent en cause l'hypothèse selon laquelle la seule contrainte commande la rupture par clivage. D'autre part, l'idée que la population de micro-défauts amorcés dès le début de la déformation plastique reste la même leur paraît trop simplificatrice.

En s'appuyant sur des travaux de Kaechele *et al.* [Kaechele et Tetelman, 1969], ils rappellent qu'il existe un lien entre le nombre de micro-défauts amorcés et la déformation plastique (Ce qui reprend l'idée de correction plastique donnée dans le modèle de Beremin), mais postulent par ailleurs que les deux événements d'amorçage et de propagation doivent être simultanés.

Ils justifient cela en indiquant que la rupture d'un carbure est un événement dynamique libérant une certaine quantité d'énergie élastique dans la matrice ferritique environnante et que cette énergie doit être mise à profit immédiatement pour propager le clivage : dans le cas contraire, le micro-défaut est émoussé par les mécanismes de plasticité.

Ainsi la probabilité de clivage P_{cleav} s'exprime-t-elle comme le produit de la probabilité d'amorçage à un moment donné P_{nucl} et de celle de propagation P_{propag} :

$$P_{cleav} = P_{nucl} \times P_{propag} \quad (5.31)$$

La probabilité d'amorçage est exprimée comme proportionnelle à la quantité suivante :

$$P_{nucl} \propto \frac{\sigma_{ys}}{\sigma_{ys,0}} \exp\left(-\frac{\sigma_{ys}(T, \dot{\epsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}} \cdot \frac{\epsilon_p}{\epsilon_{p,0}}\right) d\epsilon_p \quad (5.32)$$

où $\sigma_{ys}(T, \dot{\epsilon}_p)$ est limite d'élasticité.

La probabilité de propager un défaut en fonction de la contrainte principale est une probabilité de Weibull du même type que celle de Beremin à ceci près que les auteurs réintroduisent le seuil initialement proposé par Weibull (comme déjà fait par Hausild [Hausild, 2002]) :

$$P_{propag}(\sigma_I) = \left(\frac{\sigma_I - \sigma_{th}}{\sigma_u}\right)^m \text{ si } \sigma_I > \sigma_{th}, 0 \text{ sinon.} \quad (5.33)$$

Par une démarche tout à fait similaire à l'approche de Beremin, la probabilité de rupture de la structure P_R s'écrit selon l'équation 5.27, en remplaçant la contrainte σ_w par σ_w^* , avec :

$$\sigma_w^* = \left[\int_{V_p} \left(\int_0^{\epsilon_{p,u}} \frac{\sigma_{ys}(T, \dot{\epsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}} (\sigma_I(\epsilon_p, dV) - \sigma_{th})^m d\epsilon_p \right) \frac{dV}{V_0} \right]^{\frac{1}{m}} \quad (5.34)$$

Le terme $\frac{\sigma_{ys}(T, \dot{\epsilon}_p)}{\sigma_{ys,0}}$ n'est pas exactement le même que le terme de correction de plasticité de la formulation de Beremin [Beremin, 1983] $\exp\left(-\frac{m\epsilon_p^p}{k}\right)$, mais on peut remarquer que son influence sur la probabilité de rupture en fonction de la vitesse de déformation ou de la température est de même nature.

Le modèle WST : En prenant pour base les observations et les hypothèses micromécaniques de Curry et Knott, Wallin *et al.* [Wallin et al., 1984] considèrent que c'est la population des carbures, et donc leur taille qui va contrôler l'avancée de pointe de fissure et donc la ténacité. La rupture se produit pour une taille de carbure critique r_0 , reliée à la contrainte σ_{yy} d'ouverture à laquelle ce carbure est soumis, selon un critère inspiré de celui de Griffith :

$$r_0 = \frac{\pi E(\gamma_s + \gamma_p)}{2(1 - \nu^2)\sigma_{yy}^2} \quad (5.35)$$

où $\gamma_s + \gamma_p$ représente l'énergie effective soit l'énergie de surface et l'énergie plastique dissipée par l'émoussement en tête de fissure. La relation ne lie pas directement r_0 à la distance entre pointe de fissure et le carbure, mais cette relation est assurée par l'intermédiaire de σ_{yy} . La probabilité de rupture s'écrit :

$$P_R = 1 - \prod_{X=0}^{X_p} [1 - p(r \geq r_0)]^{N_a \cdot B \cdot dX \cdot F} \quad (5.36)$$

avec N_a le nombre de carbures par unité d'aire, B l'épaisseur de l'éprouvette (i.e. la longueur du front de fissure), F la fraction de carbures intervenant dans la rupture (indépendante de T). La résolution se fait par intégration sur la distance plastique $[0; X_p]$ sur les distances unitaires dX .

La distribution des carbures, représentée à la figure V.19, est mise sous la forme :

$$p(r_0) = \frac{c^{a-1}}{(a-2)!} \cdot \left(\frac{r_0}{\bar{r}}\right)^{-a} \cdot \exp\left[\frac{-c}{r_0/\bar{r}}\right] \quad (5.37)$$

La température influe sur la probabilité de rupture par l'intermédiaire de la composante γ_p de l'énergie de surface effective. En tenant compte des divers travaux disponibles à l'époque sur l'émoussement en tête de fissure, et en associant ce mécanisme à l'émission de dislocations, Wallin suggère que la dépendance thermique de γ_p est inversement proportionnelle à la force de Peierls-Nabarro, soit :

$$\gamma_p = \gamma_0 + (\gamma_p(T = 0K) - \gamma_0) \cdot \exp(m \cdot T) \quad (5.38)$$

avec γ_0 la partie athermique de γ_p et m la constante de la force de Peierls-Nabarro.

Le modèle de Margolin :

Ce modèle [Margolin et al., 1998], lui aussi basé sur la théorie du maillon faible, se base sur les mêmes hypothèses que les autres modèles. Le volume étudié est subdivisé en cellules unitaires. Le critère de rupture local s'appuie sur deux conditions :

- (1) $\sigma_1 + m_{T\varepsilon} \cdot \sigma_{eff} \geq \sigma_d$
- (2) $\sigma_1 \geq S_C(\varepsilon^P)$

avec :

$$S_C(\varepsilon^P) = \left[C_1^* + C_2^* \exp(-A_d \cdot \int d\varepsilon_{equ}^P) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (5.39)$$

σ_d représente une résistance à la germination (résistance des interfaces ferrite-carbure ou résistance des carbures). Ce paramètre suit une distribution de Weibull selon :

$$p(\sigma_d) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{\sigma_d}{\tilde{\sigma}_d}\right)^\eta\right] \quad (5.40)$$

$\tilde{\sigma}_d$ et η étant des paramètres de Weibull.

σ_{eff} est la différence entre contrainte équivalente et limite d'élasticité, C_1^*, C_2^* et A_d sont des constantes matériau et $m_{T\varepsilon}$ est un paramètre dépendant de la température et de la déformation plastique selon :

$$m_{T\varepsilon} = \frac{S_C(0)}{S_C(\varepsilon^P)} \cdot m_T(T) \quad (5.41)$$

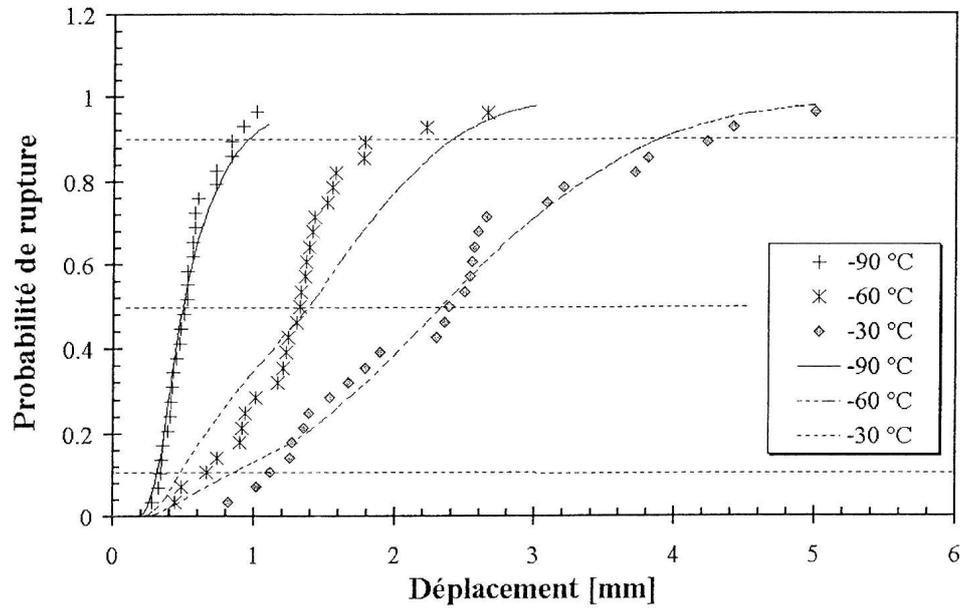


FIG. V.18 – Prédiction des résultats d’essais Charpy après identification des paramètres du modèle de Beremin en fonction de la température [Hausild, 2002].

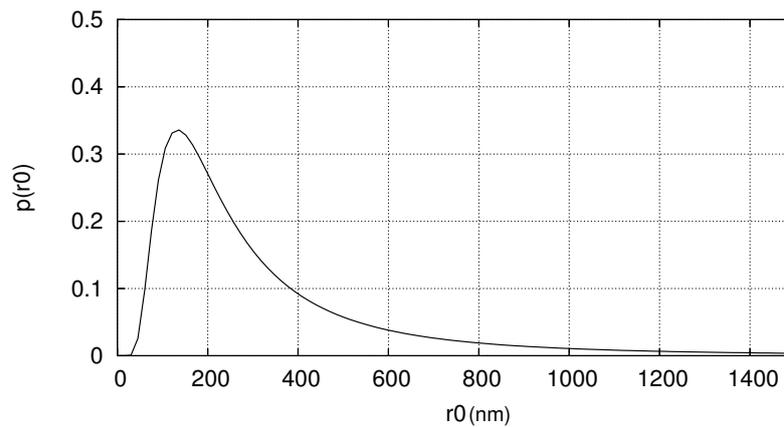


FIG. V.19 – Représentation de la densité de probabilité postulée dans le modèle WST $p(r_0)$ pour $c=4$, $a=3$ et $\bar{r}=100\text{nm}$ [Wallin et al., 1984].

Ce modèle est donc basé sur deux conditions :

- La condition (1) est celle de la germination des micro-fissures de clivage. C'est le premier critère qui entre en jeu lors d'essais sur des géométries lisses.
- La condition (2) est une condition de propagation pour ces micro-fissures, et dans le cas où la géométrie est entaillée ou fissurée, est le critère prépondérant

Le modèle de Kroon-Faleskog :

Ce modèle est lui aussi basé sur la théorie du maillon faible [Kroon et Faleskog, 2002]. La contribution d'un élément de volume dV à la probabilité de rupture est donnée par :

$$dP_R = h(\varepsilon, \sigma) \frac{dV}{V_0} \quad (5.42)$$

où la fonction h est définie par :

$$h(\varepsilon_e^p, \bar{\sigma}_1) = c \cdot \varepsilon_e^p \times \exp\left(-\left(\frac{\eta \sigma_{th}}{\bar{\sigma}_1}\right)^2\right) - \exp(-\eta^2) \quad (5.43)$$

avec ε_e^p , la déformation plastique effective, c , σ_{th} et η des paramètres matériau, et $\bar{\sigma}_1$, un indicateur d'état de contrainte non local, défini par les auteurs comme la valeur moyenne de la plus grande contrainte principale sur un volume de matière sphérique. Cet indicateur est explicité dans la relation 5.44, et illustré par la figure V.20.

$$\bar{\sigma}_1(X) = \frac{1}{V_L} \int_{V_L} \sigma_1(X - \hat{X}) d\hat{V} \quad (5.44)$$

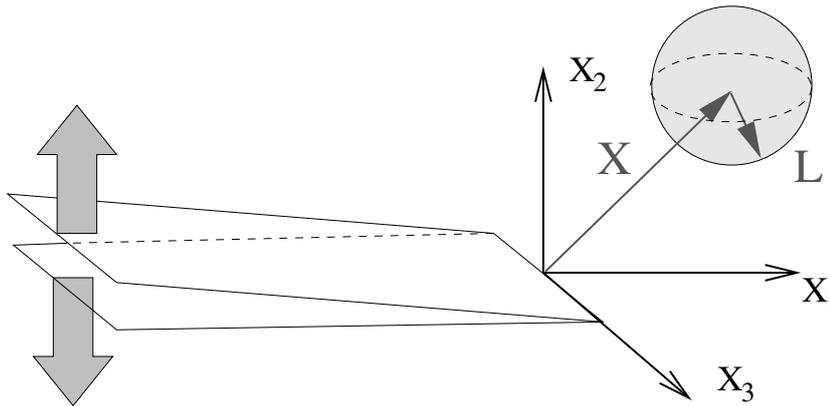


FIG. V.20 – Illustration du volume pris en compte pour le calcul de $\bar{\sigma}_1$.

La probabilité de rupture cumulée à un instant donné peut être déduite en post-traitement selon :

$$P_R = 1 - \exp\left(-\int_V h_{max} \frac{dV}{v_0}\right) \quad (5.45)$$

avec h_{max} le maximum de $h(\epsilon_e^p(X), \bar{\sigma}_1(X))$ pendant l'histoire du chargement. Pour qu'une micro-fissure devienne critique, le niveau de contrainte devra être assez élevé sur une assez longue distance, ce qui dans ce modèle est pris en compte au travers de l'indicateur $\bar{\sigma}_1$. Le paramètre de longueur L est pour les auteurs un paramètre matériau au même titre que l'était la taille du volume élémentaire de Beremin. La description de la transition se fait par l'intermédiaire d'une augmentation avec la température de σ_{th} , compensée par une diminution du facteur c . L'application de ce modèle à un acier de cuve traité thermiquement pour décaler la transition vers les plus hautes températures montre une bonne corrélation avec les données expérimentales obtenues par des essais Charpy. Une méthode de calage des paramètres est d'ailleurs exposée dans [Faleskog et al., 2004].

Le modèle EOH : Ce modèle, extension du modèle OH [Ortner et Hipsley, 1996], utilise deux hypothèses fortes :

- Le traitement thermique de trempe subi par les aciers entraîne, par le jeu des contraintes internes, une fissuration des carbures les plus gros avant même la mise en service de la structure. Lors de la trempe, un défaut se crée donc, mais la matrice entourant les carbures les plus importants, plutôt que de propager le défaut, l'éponge. L'explication tient à la température relativement élevée du matériau au moment de la trempe. Cela permet de proposer une taille maximale de carbures r_c^{max} dans la structure.
- Les carbures non fissurés lors de la trempe sont tout de même soumis à une contrainte résiduelle. Ainsi, pour qu'ils cassent, il faudra qu'ils soient soumis à une déformation élastique minimum, dont la description est donnée par la mécanique des milieux continus (équation 5.46), en gardant un comportement purement élastique pour les carbures et en postulant l'égalité des déformations entre la matrice et ceux-ci.

$$\epsilon_{particle}^e = \epsilon_{particle}^t = \epsilon_{matrix}^t = \frac{\sigma_{11_{matrix}}}{E_{matrix}} + \epsilon_{matrix}^p > \epsilon_{particle_{mini}}^e \quad (5.46)$$

Dès lors, le micro-défaut peut se propager selon un critère de type Griffith :

$$r > r_0 = \frac{2 \cdot E(\gamma_{eff})}{(1 - \nu^2) \sigma_{11_{matrix}}^2 \pi} \quad (5.47)$$

La probabilité de rupture cumulée s'écrit alors, en fonction de la distance X au front de fissure :

$$P_R = 1 - \prod_{X=0}^X \left[(1 - p(r \geq r_0)) \cdot (1 - p(\epsilon_{particle}^e \geq \epsilon_{particle_{mini}}^e)) \right] \quad (5.48)$$

c) Conclusion partielle sur les modèles d'approche locale

La plupart des modèles d'approche locale de la rupture présentés ont en commun de dériver de l'hypothèse du maillon faible. Parfois, ces modèles incluent un critère en

propagation, voire tentent de modéliser le franchissement des barrières micro-structurales, mais c'est toujours la "rupture sur une longueur (i.e. une aire ou un volume) caractéristique" qui contrôle la rupture d'une structure.

L'approche du groupe de travail Beremin sur la ténacité de l'acier de cuve a été employée avec succès au cas du clivage de l'acier de cuve à très basse température, mais peine à décrire l'entrée dans la transition fragile-ductile. Pour remédier à cela, plusieurs approches ont été proposées afin d'enrichir ou de modifier ce modèle qui reste une base commune, et une référence en ce qui concerne la rupture fragile. Classiquement, ces enrichissements visent à élargir le champ d'application de la théorie du maillon faible au plus grand nombre de géométries (fissurées, entaillées, lisses) et à une plus grande plage de températures. Cela passe par deux solutions principales :

- L'ajout de phénomènes considérés comme déclencheurs par l'utilisation de lois pluri-modales, que ce soit par l'introduction de paramètres supplémentaires ou de seuils.
- la dépendance des paramètres des distributions statistiques (de Weibull par exemple) à la température.

On note que les différentes nuances d'aciers, et donc les différentes microstructures amènent à diverses interprétations au niveau des phénomènes déclencheurs et des entités microstructurales contrôlant la rupture. Une revue des observations expérimentales amenant à ces choix est proposée par la suite, les différentes interprétations pouvant être contradictoires.

Les modélisations s'appuient la plupart du temps sur des calculs de structure. La plupart de ces calculs font appel à des lois de comportement phénoménologiques, ne pouvant rendre compte localement des irrégularités des champs de contraintes et de déformations dues aux hétérogénéités de microstructures (carbures, joints de grains), ce qui exclue toute approche déterministe de la rupture. Ces modèles nécessitent donc l'utilisation de distributions statistiques pour rendre compte de la diversité des phénomènes locaux, eux-mêmes dépendant sur une structure donnée de la microstructure (présence d'un défaut ou non). De plus, le lien entre les micromécanismes et la modélisation de la rupture, notamment par l'approche locale, ne se fait pas de manière naturelle : on ne dispose que très rarement d'un outil à même de vérifier l'effet des paramètres microscopiques (tailles de défaut, dispersion des champs locaux...) sur la rupture, y compris pour le volume élémentaire de l'approche locale.

L'apport des simulations de microstructure présentées au chapitre IV peut dès lors être envisagé sous deux aspects principaux :

- Une approche probabiliste consistant à utiliser le calcul de manière analogue à ce qui a été fait précédemment, tout en utilisant la richesse des informations sur les champs mécaniques obtenue pour affiner les critères.
- Une approche plus déterministe, qui reproduirait les écarts de comportement à rupture par une multitude d'essais virtuels sur différentes réalisations de microstructure. Les

critères de rupture pourraient alors se voir simplifiés, et leur signification "physique" serait rendue plus directe.

C'est la seconde solution qui a été choisie, et qui sera développée par la suite dans la section V.3. Un outil se basant sur le calcul d'agrégat présenté au chapitre précédent, est proposé par la suite, pour lier la probabilité de rupture à la microstructure et au chargement de manière naturelle.

V.3 Une approche locale à l'échelle microscopique

V.3.1 Mise en place du problème

a) Hypothèses de base sur les mécanismes de rupture

En prenant pour base la description locale des champs mécaniques rendue possible par la simulation multi-échelles présentée au chapitre précédent, on applique un critère de rupture à l'échelle microscopique basé sur les hypothèses suivantes :

- **(H1)** Les carbures et autres particules de seconde phase sont à l'origine de l'amorçage des défauts présents au sein de la microstructure, selon un mécanisme similaire à celui proposé par Smith [Smith, 1966]. L'effet des particules de plus grande taille (sulfures de manganèse) n'est pas pris en compte à l'échelle considérée.
- **(H2)** L'amorçage se faisant sur des particules de seconde phase, on considère que c'est l'activité plastique qui commande cet amorçage, que ce soit par rupture de la particule de seconde phase [Ortner, 2002], ou par création d'un défaut par empilement de dislocations [Smith, 1966]. Cela conduit à un seuil au niveau de la déformation plastique équivalente pour provoquer l'amorçage.
- **(H3)** La population de carbures se compose à la fois d'amas présents au sein des lattes, ayant un fort rôle sur les hétérogénéités de comportement, mais aussi de carbures de plus grandes tailles isolés à même de provoquer la rupture par clivage. On peut donc utiliser une distribution de taille de carbures standard pour décrire la population de taille de défauts : les plus petits carbures, majoritairement présents au sein des amas, n'interviendront pas sur la rupture (mais sur le comportement au travers de la modélisation de l'effet "composite").
- **(H4)** Une fois le défaut amorcé, on considère que sa propagation dans la matrice ferritique environnante est pilotée par un critère de type Griffith (équation 5.7). Le clivage de la ferrite se faisant principalement sur les plans de la famille {001}, c'est la contrainte locale au sein de la matrice ferritique projetée sur ces plans qui est prise en considération.
- **(H5)** Les plus gros défauts (taille supérieure à r_c^{max}) sont amorcés dès le début de la plasticité, et sont émoussés plutôt que propagés, amenant à considérer une taille de défaut seuil au-delà de laquelle on n'active pas le mécanisme de clivage [Ortner, 2002].
- **(H6)** Le franchissement des barrières microstructurales n'est pas le mécanisme critique dès lors que la contrainte pour provoquer la propagation d'un défaut est atteinte. On applique donc l'hypothèse du maillon le plus faible : la propagation d'un micro-défaut dans la matrice ferritique environnante conduit à la rupture du volume considéré.

b) Positionnement du problème

On peut donc dès lors imaginer ce que l'on peut attendre de ce type de modélisation. Elle n'a pas pour vocation d'expliquer tous les mécanismes globaux pouvant mener à la rupture mais plutôt de s'intéresser, à une échelle très locale, à l'effet voire à la pertinence de la prise en compte des paramètres généralement considérés sur la rupture d'un élément de volume.

L'idée est simple : on remarque expérimentalement dans tous les travaux précédents utilisant l'approche locale des effets de différents paramètres microstructuraux sur la rupture par clivage, qui font varier les paramètres de l'approche locale déterminés expérimentalement. Toutefois, il n'est pas toujours aisé de donner une explication ou une tendance claire de ces effets. On met en place ici un outil qui permet de tester virtuellement ces effets à l'échelle du volume élémentaire.

Ainsi, si on ne pourra pas directement tester l'effet macroscopique d'une déchirure ductile à proximité du volume testé, rien n'empêche d'imposer à ce volume le chargement vu à proximité de la déchirure.

Enfin, on a choisi ici de se limiter aux hypothèses émises précédemment, certainement restrictives. Limiter par exemple le mécanisme d'amorçage à l'amorçage sur les carbures est *a priori* discutable.

L'avantage de cette restriction ici sera de pouvoir étudier ce seul phénomène à l'échelle microscopique, et donc de bien caractériser son rôle. Par ailleurs, il est bien évident qu'il sera possible de transposer l'ensemble de la démarche qui est présentée par la suite à d'autres types de micromécanismes d'amorçage, voire, sous certaines conditions, à l'enchaînement de plusieurs d'entre eux.

V.3.2 Méthodologie de traitement des simulations : obtention d'une probabilité de rupture cumulée

a) Volume considéré et attribution des carbures

Si l'étape d'identification nécessite d'utiliser un nombre suffisant de grains, on préfère utiliser pour modéliser la rupture une discrétisation plus fine de maillage afin d'améliorer la description des champs locaux. Ainsi c'est le deuxième type de maillage présenté à la figure IV.13 qui est utilisé.

On considère une simulation de chargement sur agrégats telle que celle proposée au chapitre précédent, à la différence que le chargement est ici triaxié. On considère un volume qui représentera le volume V_0 d'étude, qui peut être l'agrégat complet ou une partie de celui-ci.

L'étude de la microstructure d'un acier Euro 'A' (Norme allemande DIN 22NiMoCr37), très proche du 16MND5, fournie par Ortner [Ortner et al., 2005] donne non seulement l'allure de la distribution des carbures, mais aussi un dénombrement N des carbures par unité de volume :

$$p(r \geq r_0) = f(r_0) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{r_0}{3.6 \cdot 10^{-8}}\right)^{-2.7}\right), \quad N = (7.6 \pm 2.4) \cdot 10^{17} m^{-3} \quad (5.49)$$

On attribue à chaque point d'intégration du volume V_0 un certain nombre n de carbures, qui suit une loi normale tronquée de moyenne n_{moy} et d'écart type $\sigma_n = 4$ [MacDougall, 1987].

Par exemple, en considérant le maillage 2 de la figure IV.13 (200 grains pour 22x22x22 éléments à 27 noeuds), et en enlevant les deux couches d'éléments extérieurs pour éviter les effets de surface, puis en prenant une taille de grains d_g d'environ $10 \mu m$, le volume V_0 valant :

$$V_0 = \left(\sqrt[3]{200} \cdot \frac{18}{22}\right) \cdot 10 \cdot 10^{-6})^3 \approx 50 \times 50 \times 50 \mu m^3 \quad (5.50)$$

$$n_{moy} = \frac{V_0 \cdot N}{18^3 \cdot 27} = 0,603 \quad (5.51)$$

Cela conduit à une répartition des carbures telle que montrée à la figure V.21.a, certains points d'intégration ne se voyant attribuer aucun carbure. On effectue ensuite pour chaque point d'intégration un tirage de ces n carbures, en respectant la loi de probabilité cumulée donnée à l'équation 5.49. Pour cela, il suffit d'inverser la fonction f , puis de l'appliquer à un tirage de nombre aléatoire x obtenu suivant une loi uniforme sur l'intervalle $[0 : 1]$:

$$F(x) = f^{-1}(x) = b(-\ln(x))^{\frac{1}{a}} \quad (5.52)$$

Dans le cas où l'on a tiré plusieurs tailles de carbures au point d'intégration, on recherche la taille du plus gros carbure r tiré, inférieure à la taille r_c^{max} (selon l'hypothèse H5). On attribue au point d'intégration une contrainte critique σ^{grif} pour la propagation du clivage depuis le plus gros défaut suivant le critère de Griffith pour une fissure penny-shape, donnée à l'équation 5.7. Les points d'intégration où l'on n'a pas tiré de tailles de carbures se voient par ailleurs attribuer une valeur de σ^{grif} très élevée. On obtient ainsi sur le volume une distribution de contraintes critiques pour la propagation du clivage. Une distribution de contraintes de Griffith sur l'agrégat est présentée à la figure V.21.b. On rappelle que cette distribution dépend par ailleurs de r_c^{max} et de γ_p .

On peut ainsi recommencer le tirage complet d'une "microstructure virtuelle", et obtenir une répartition de contraintes critiques de clivage σ^{grif} différente.

b) Contrainte effective sur les plans de clivage et détection du moment de rupture

La plupart des travaux d'approche locale utilise un critère en contrainte pour le clivage portant sur la première contrainte principale. Toutefois, la simulation permet de disposer ici d'une représentation micromécanique. On connaît l'orientation du réseau cristallin à chaque point d'intégration, et on peut donc projeter le tenseur des contraintes σ (voire le tenseur des

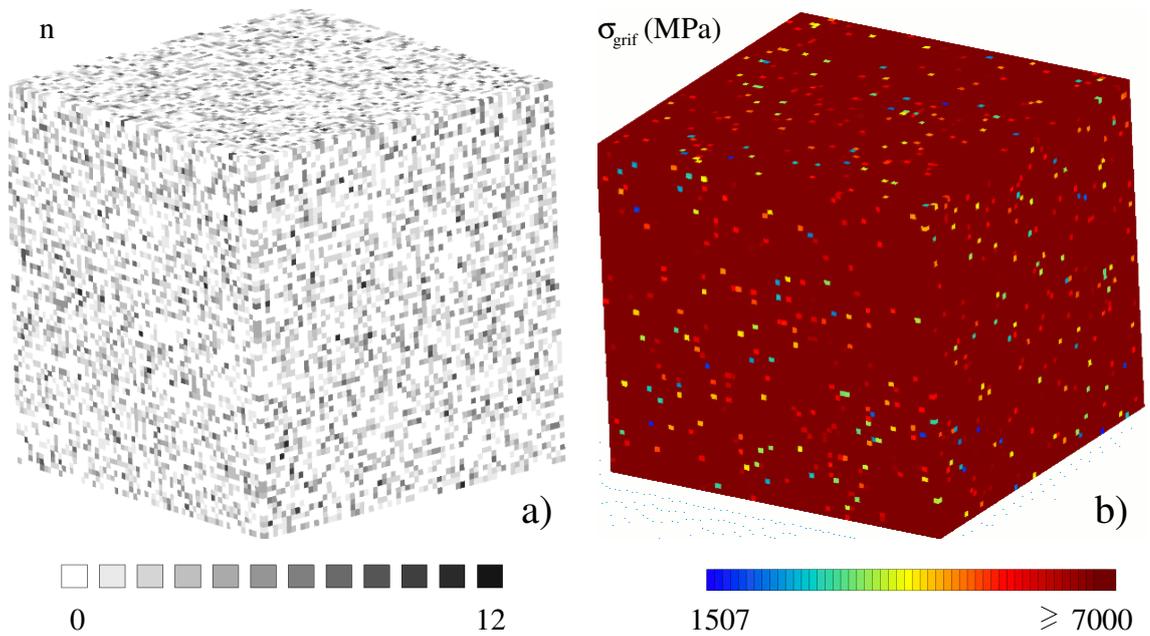


FIG. V.21 – Distribution du nombre de carbures, et de la contrainte de Griffith pour un tirage de distribution de carbures suivant les équations 5.51 et 5.52. a) Nombre de carbures n attribué à chaque point d'intégration (on vérifie bien $n_{moy} = 0.603$), b) contrainte de Griffith minimale associée aux n carbures à chaque point d'intégration (ici pour $\gamma_p = 6J.m^{-2}$ et $r_c^{max} = 1\mu m$).

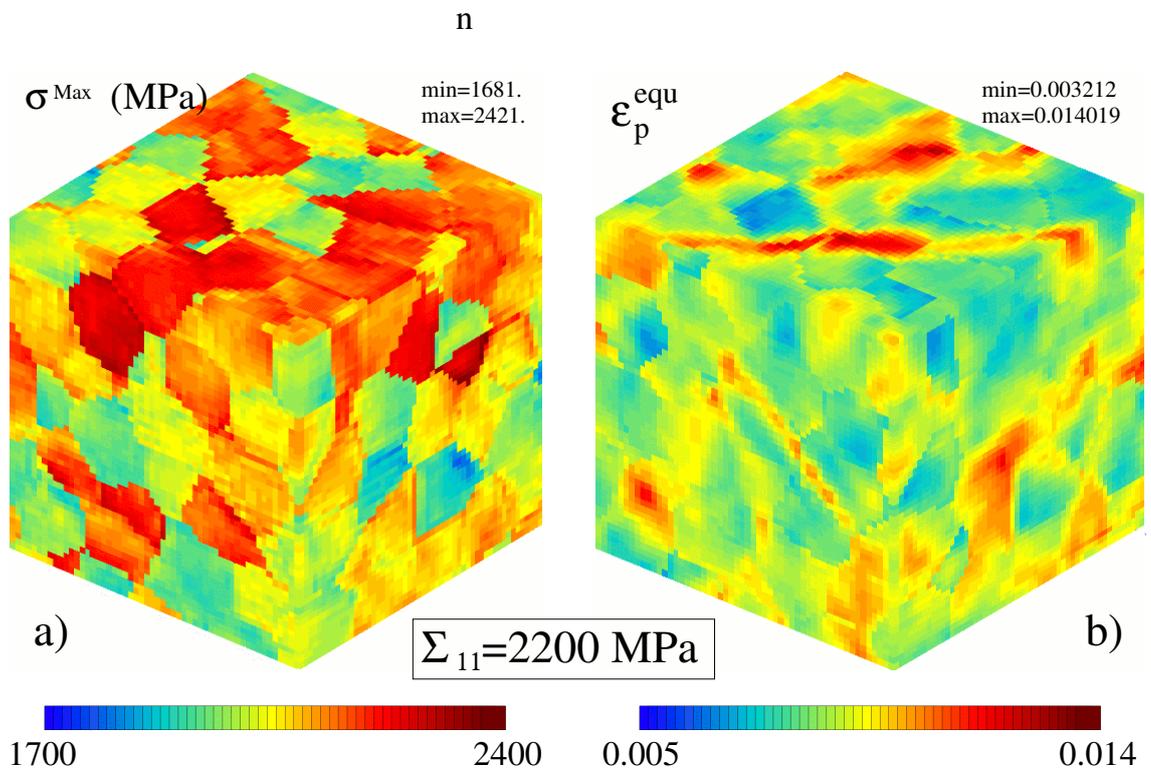


FIG. V.22 – Contrainte effective de clivage et déformation plastique équivalente pour le calcul T4 ($\chi = 3$, $\zeta = 0,835$), représentée sur un volume V_0 de $18 \times 18 \times 18$ éléments soit $50 \times 50 \times 50 \mu m^3$. $T = -150^\circ C$

contraintes corrigé $\underline{\sigma}^*$, ce qui sera discuté plus loin) en chaque point d'intégration sur les plans p de clivage (famille {001}) de normale \underline{n}^p :

$$\sigma^p = \underline{n}^p \cdot \underline{\sigma} \cdot \underline{n}^p \quad \text{avec } p = (001), \quad p = (010) \quad \text{ou} \quad p = (100) \quad (5.53)$$

On détermine ensuite la contrainte effective maximale sur les plans de clivage σ_c^{max} comme étant la contrainte de clivage maximale en chaque point d'intégration :

$$\sigma_c^{max} = \text{Max}\{\sigma^p\} \quad (5.54)$$

Cette contrainte effective maximale de clivage, (représentée à la figure V.22.a), est ensuite comparée à la contrainte de Griffith pour la propagation d'un défaut, dont l'amorçage est commandé par une déformation plastique équivalente minimale ϵ_p^{mini} (figure V.22.b) au niveau de chaque point d'intégration. L'instant de rupture t_r du volume V_0 pour le tirage de carbure considéré est déterminé selon l'hypothèse **H6** comme étant le premier instant où, au niveau d'un point d'intégration :

$$\text{et} \begin{cases} \sigma_c^{max} \geq \sigma^{grif} \\ \epsilon_p^{equ} \geq \epsilon_p^{mini} \end{cases} \quad (5.55)$$

La simulation du comportement étant effectuée par pas de temps, entre des instants t_n , on calcule aussi la valeur instantannée des différentes variables locales ou moyennées sur V_0 . Cela consiste pour chaque variable v (qu'elle soit scalaire, vectorielle ou tensorielle) en une interpolation linéaire entre deux instants de la simulation t_1 et t_2 tels que t_r soit compris dans l'intervalle $[t_1 : t_2]$ d'une valeur v_n :

$$v_n = v_1 + (v_2 - v_1) \frac{t_r - t_1}{t_2 - t_1} \quad (5.56)$$

Par ailleurs, le module développé permet aussi de calculer les trois contraintes principales macroscopiques sur V_0 au moment de la rupture. Dans le cas des calculs triaxiés évoqués ici, ces trois contraintes seront égales aux trois composantes diagonales du tenseur des contraintes macroscopiques Σ :

$$\Sigma_I = \Sigma_1 \quad \Sigma_{II} = \Sigma_2 \quad \Sigma_{III} = \Sigma_3 \quad (5.57)$$

c) Probabilité de rupture cumulée du volume élémentaire

Un certain nombre N_s de traitement de la même simulation est effectué, en faisant varier à chaque fois la distribution des défauts par un nouveau tirage aléatoire.

Afin de rapprocher les résultats obtenus des résultats classiques des démarches d'identification de l'approche locale, on classe l'ensemble des N_s résultats dans l'ordre croissant en fonction du temps de rupture t_r . Un rang i tel que $i = 1 \dots N_s$ leur est attribué,

ainsi qu'un estimateur de probabilité de rupture P_r , emprunté au traitement expérimental des données du modèle de Beremin [Bernauer et al., 1999] :

$$P_r = \frac{i - 0,5}{N_s} \quad (5.58)$$

La plupart des grandeurs mécaniques macroscopiques v_n (\mathbf{E} , Σ , E_p^{equ} , Σ_p) associées au temps de rupture possède le même classement i , puisque leur évolution est monotone croissante. D'autres valeurs locales telles que la taille du carbure ayant provoqué la rupture r_{rupt} , ou la déformation plastique équivalente au point d'intégration de rupture ϵ_p^{equ} , nécessitent toutefois d'être reclassées individuellement afin de représenter une probabilité de rupture cumulée, car leur évolution n'est pas forcément monotone croissante avec le temps à rupture. On dénommera alors la probabilité de rupture associée en lui associant le nom de la variable considérée ($P_r(r_{rupt})$ par exemple).

On rapproche les résultats obtenus de la modélisation de Beremin, par l'intermédiaire de l'expression de la contrainte de Weibull donnée à l'équation 5.26. Pour toutes les modélisations triaxiales évoquées ici, la rupture interviendra toujours alors que l'ensemble du volume V_0 constitue le volume plastique, si bien que dans notre cas, on peut écrire :

$$\sigma_W = \Sigma_I = \Sigma_1 \quad (5.59)$$

d) Conditions de simulations

Chargements imposés, travail à triaxialité imposée : De nombreux travaux donnent des indications du chargement trouvé au point d'amorçage de la rupture des éprouvettes rompues par clivage, et notamment ceux de Rossol, effectués sur le même matériau pour des températures comparables à celles identifiées ici [Rossol, 1998]. Il indique qu'au point de propagation du clivage, on peut atteindre une plus grande contrainte principale d'environ 2400 MPa. De la même façon, il remarque que le taux de triaxialité χ est relativement important, d'une valeur typiquement comprise entre 1,8 et 3.

Afin de se donner une marge, les simulations seront menées jusqu'à ce que la plus grande contrainte macroscopique Σ_1 atteigne 2500 MPa. Un bref retour au chapitre précédent montre bien qu'il est illusoire de vouloir atteindre une telle contrainte principale en traction, voire en traction biaxiale : il faut alors atteindre des déformations équivalentes inaccessibles par la modélisation employée ici, ne serait-ce qu'à cause de l'hypothèse des petites perturbations. Par contre, on peut atteindre de tels chargements en considérant un chargement triaxial.

Afin d'étudier l'effet éventuel de la triaxialité sur la rupture, on travaillera à triaxialité imposée pendant le chargement, soit en imposant les contraintes sur les faces de l'agrégat. Trois contraintes principales Σ_1 , Σ_2 , et Σ_3 caractérisent le chargement et obéissent aux règles suivantes en cours de sollicitation :

$$\Sigma_1 \geq \Sigma_2 \geq \Sigma_3, \quad \Sigma_2 = \alpha \Sigma_1, \quad \Sigma_3 = \beta \Sigma_1 \quad (5.60)$$

On caractérisera la charge imposée en cours de sollicitation de l'agrégat, et donc le taux de triaxialité non seulement par la valeur de χ qui est donnée par l'équation 5.8, mais aussi par le coefficient ζ qui caractérise la pression normée par la première contrainte principale. En effet pour une même contrainte principale, et un même taux de triaxialité χ , des valeurs différentes de α et β (i.e. de ζ) mènent à des répartitions locales de contraintes différentes. On peut ainsi exprimer la triaxialité selon :

$$\chi = \frac{1 + \alpha + \beta}{3\sqrt{1 + \alpha^2 + \beta^2 - (\alpha + \beta + \alpha\beta)}} \quad (5.61)$$

$$\text{soit } \chi = \frac{1 + 2\alpha}{3(1 - \alpha)} \quad \text{si } \beta = \alpha \quad (5.62)$$

l'expression de la pression relative étant alors :

$$\zeta = \frac{p}{\Sigma_1} = \frac{1 + \alpha + \beta}{3} \quad (5.63)$$

On a effectué une série de neuf simulations à triaxialité imposée (dénommées T1 à T9). La figure V.23 illustre les différents chargements envisagés, qui sont par ailleurs détaillés au tableau V.1. L'effet de la température est pris en compte pour un seul jeu de paramètres $\{\chi; \zeta\}$.

Les coefficients α et β ont été choisis pour pouvoir comparer, toutes choses égales par ailleurs les effets de la température (T1,T5,T6,T7), de la pression relative (T1,T8,T9) et de la triaxialité (T1,T2,T3,T4). On possède ainsi tous les outils pour décrire de manière univoque le chargement macroscopique appliqué.

e) Conditions aux limites

On ne peut dès lors plus raisonnablement travailler à déformation ou déplacement imposé : le chargement en CHC (cf annexe A-III) sur la surface apparaît comme l'approche la plus correcte pour imposer la triaxialité (en effet, le moyen le plus simple de travailler à triaxialité constante est que le rapport entre les composantes du tenseur des contraintes reste constant).

Enfin, il convient d'ajouter des conditions aux limites empêchant l'effet de surface libre. Les lois de comportements ont été identifiées avec des conditions de DNI, qui imposent implicitement que les déplacements normaux soient homogènes pour les faces du VER (les faces restent planes). Pour le cas des simulations de chargement triaxié, des conditions de PSI ont donc été imposées sur les surfaces afin que la perturbation imposée en surface par les CAL soit de la même nature, et n'influe pas différemment sur le comportement global.

Enfin, on note que l'on choisit de travailler en prenant en compte la correction sur le champ de contrainte indiquée à l'équation 4.40. Cet aspect est discuté à l'annexe A-V.

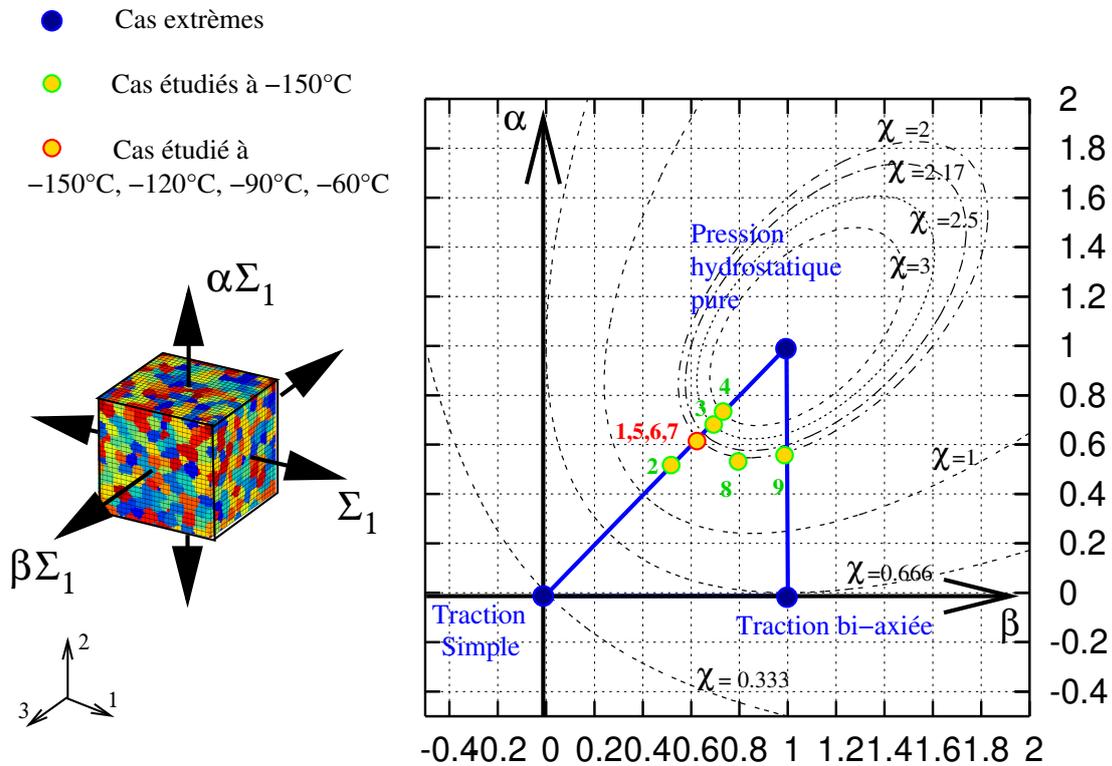


FIG. V.23 – Représentation des taux de triaxialités étudiés. Les données sont détaillées au tableau V.1.

calcul <i>nom</i>	température $T(^{\circ}\text{C})$	triaxialité χ	pression relative ζ	paramètres	
				α	β
T1	-150	2	0.75	0.625	0.625
T2	-150	1.75	0.724	0.586	0.586
T3	-150	2.5	0.789	0.684	0.684
T4	-150	3	0.835	0.728	0.728
T5	-120	2	0.75	0.625	0.625
T6	-90	2	0.75	0.625	0.625
T7	-60	2	0.75	0.625	0.625
T8	-150	2	0.783	0.8	0.55
T9	-150	2	0.857	1	0.572

TAB. V.1 – Caractéristiques du chargement pour les simulations.

V.3.3 Comparaison de l'allure de la probabilité avec celle de l'approche de Beremin

La figure V.24 présente ainsi une probabilité de rupture cumulée simulée du volume V_0 de taille $50 \times 50 \times 50 \mu m^3$ obtenue à partir du calcul T1 auquel on a attribué une centaine de tirages de distributions de carbures. On constate tout d'abord que l'allure de la courbe est effectivement très proche d'une probabilité de rupture cumulée utilisée dans l'approche de Beremin dont l'équation est de la forme : $1 - \exp\left(\frac{\sigma}{\sigma_u}\right)^m$.

Afin d'approximer la probabilité de rupture cumulée par une probabilité de même forme que celle donnée dans la formulation de Beremin (équation 5.27), on utilise classiquement la régression linéaire [Carassou, 1999]. Cela conduit, dans notre cas, à rechercher les paramètres m et σ_u tels que la droite dont l'équation est donnée par :

$$\text{et } \begin{cases} Y = m \cdot X - m \cdot \ln(\sigma_u) \\ X = \ln(\Sigma_1) \\ Y = \ln\left(\ln\left(\frac{1}{1-P_r}\right)\right) \end{cases} \quad (5.64)$$

soit la plus proche au sens des moindres carrés de l'ensemble des doublets $\left(\ln(\Sigma_1); \ln\left(\ln\left(\frac{1}{1-P_r}\right)\right)\right)$.

Le résultat de la régression pour le calcul sur T1 est lui aussi indiqué à la figure V.24. Les valeurs obtenues de m et σ_u n'étant pour l'instant que des valeurs indicatives. On notera par ailleurs que lorsque l'on cherche à déterminer m et σ_u pour une série d'essais expérimentaux, la procédure est différente de celle présentée ici : elle est itérative, puisque dans ce cas σ_w dépend de m et donc du volume plastique à l'instant t . Le problème ne se pose pas ici, puisque l'ensemble du volume est considéré comme chargé uniformément.

Dans le cas présent, l'identification des paramètres m et σ_u sur la régression linéaire est à nouveau faite à l'aide du logiciel Gnuplot. Ce premier résultat obtenu est tout à fait remarquable : il démontre que l'application d'un critère déterministe basé sur la représentation micromécanique du comportement et de la rupture mène directement à une forme de probabilité de rupture cumulée du volume élémentaire de la même forme que celle postulée par le groupe de travail Beremin. En ce sens, on valide complètement la démarche proposée dans ces travaux.

A partir de maintenant l'ensemble des résultats présentés en terme de probabilité de rupture cumulée le sera en indiquant les valeurs de m et σ_u identifiées.

V.3.4 Étude paramétrique

a) Effet du critère de déformation plastique locale

Afin de rester cohérent avec les approches locales courantes, un critère en germination a été introduit dans la démarche. Ainsi, on considère qu'une déformation plastique locale

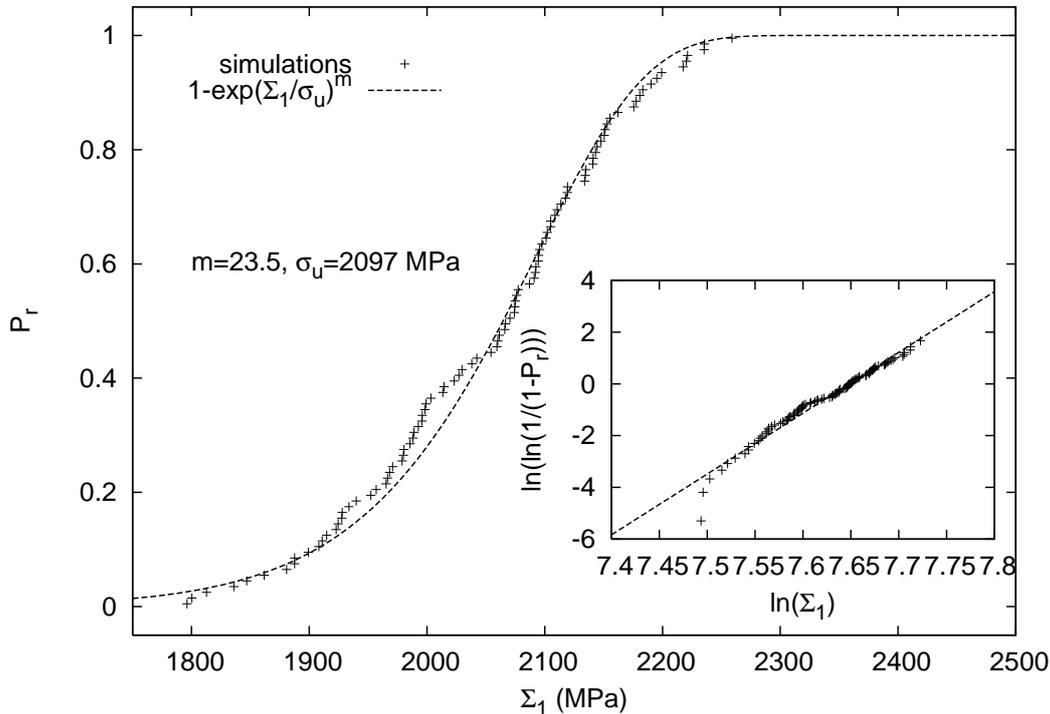


FIG. V.24 – Détermination de m et σ_u : exemple de régression linéaire. Post-traitement effectué sur la simulation T1 ($\chi = 2$, $\zeta = 0.75$, $T = -150^\circ\text{C}$ voir d)). Paramètres du post-traitement : $r_c^{max} = 1\mu\text{m}$, $\gamma_p = 12\text{J.m}^{-2}$, $\varepsilon_p^{min} = 10^{-5}$.

minimale ε_p^{min} au niveau du point d'intégration est nécessaire pour amorcer la fissure sur le carbure.

On rappelle qu'habituellement dans l'approche locale, c'est sur le VER que ce critère est formulé (et donc sur E_p^{min}). L'influence de l'introduction d'un critère local ε_p^{min} en germination est observable à la figure V.25 (pour 2 triaxialités, 1.75 et 3).

L'évolution des paramètres m et σ_u est donnée au tableau de la figure V.25. On se rend bien compte que ce critère n'est ici pas vraiment pertinent, et cela s'explique relativement simplement. Les points d'intégration où peut se propager une microfissure sont les points fortement chargés en contrainte qui sont aussi ceux où l'activité plastique a fait augmenter la contrainte. On confirme ainsi l'idée que selon les hypothèses de modélisation retenues, la propagation est l'événement déclencheur du clivage.

On prendra pour ε_p^{min} une valeur communément admise de 10^{-5} [Ortner et al., 2005].

b) Effet du critère de taille de carbure maximale

L'influence du paramètre r_c^{max} est représentée à la figure V.26. On y montre l'évolution de la probabilité de rupture en fonction de la première contrainte principale due à la taille de carbure maximum pour le calcul T4 ($\chi=3$). On a choisi ce calcul à forte triaxialité car c'est celui pour lequel l'effet de r_c^{max} est le plus significatif.

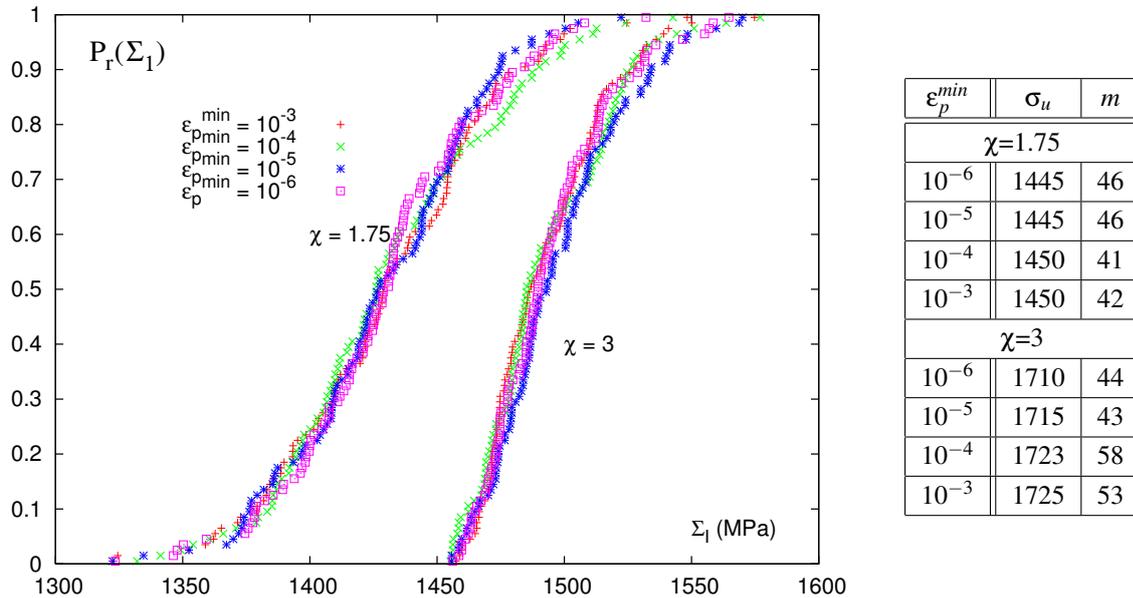


FIG. V.25 – Évolution de m et σ_u avec le critère local de germination ϵ_p^{min}

La première constatation est que pour les différentes tailles de carbure maximales, on fait effectivement varier les paramètres identifiés σ_u et m (voir figure V.26.a). On constate logiquement qu'une plus faible taille de carbure maximale fait globalement augmenter la contrainte nécessaire à la propagation, et l'on explique ainsi l'évolution de σ_u .

L'effet de r_c^{max} sur m est lui moins trivial. Afin de l'expliquer et aussi de vérifier si le fait de définir une taille de carbure maximale ne provoque pas un écrêtement de la taille de carbure qui a provoqué la rupture r_c^{rupt} , on a tracé dans le graphe V.26.b cette taille de carbure r_c^{rupt} normée par la taille de carbure r_c^{max} . On remarque bien qu'une plus faible taille de carbure maximale imposée a tendance à favoriser le pilotage par la contrainte de la rupture, la taille de carbure se rapprochant alors de r_c^{max} .

Cela s'explique par l'observation de la probabilité $p(r_c > r)$ (figure V.26.c). La probabilité de trouver un carbure proche de r_c^{max} est beaucoup plus forte pour une taille de $0,5 \mu\text{m}$ que pour $1,5 \mu\text{m}$, ce qui a tendance à diminuer la dispersion sur la taille de carbure qui provoque la rupture et donc à augmenter la valeur de m . Cet effet est contrebalancé par une plus forte dispersion des contraintes σ_c^{Max} pour les plus fortes valeurs de contrainte principale (figure V.26.d).

Ces constatations amènent à s'interroger sur l'emploi du critère r_c^{max} , d'autant plus qu'aucune observation expérimentale ne le justifie. L'idée de tronquer la queue de distribution de tailles de carbures de manière abrupte est certainement nécessaire dans ce cas, mais comme on l'a évoqué, cette nécessité semble liée à une mauvaise représentation de la queue de distribution des tailles de carbures.

Il nous faut toutefois choisir une valeur, sous peine de détecter la rupture pour des contraintes principales bien trop faibles. Dans ses observations Ortner [Ortner et al., 2005]

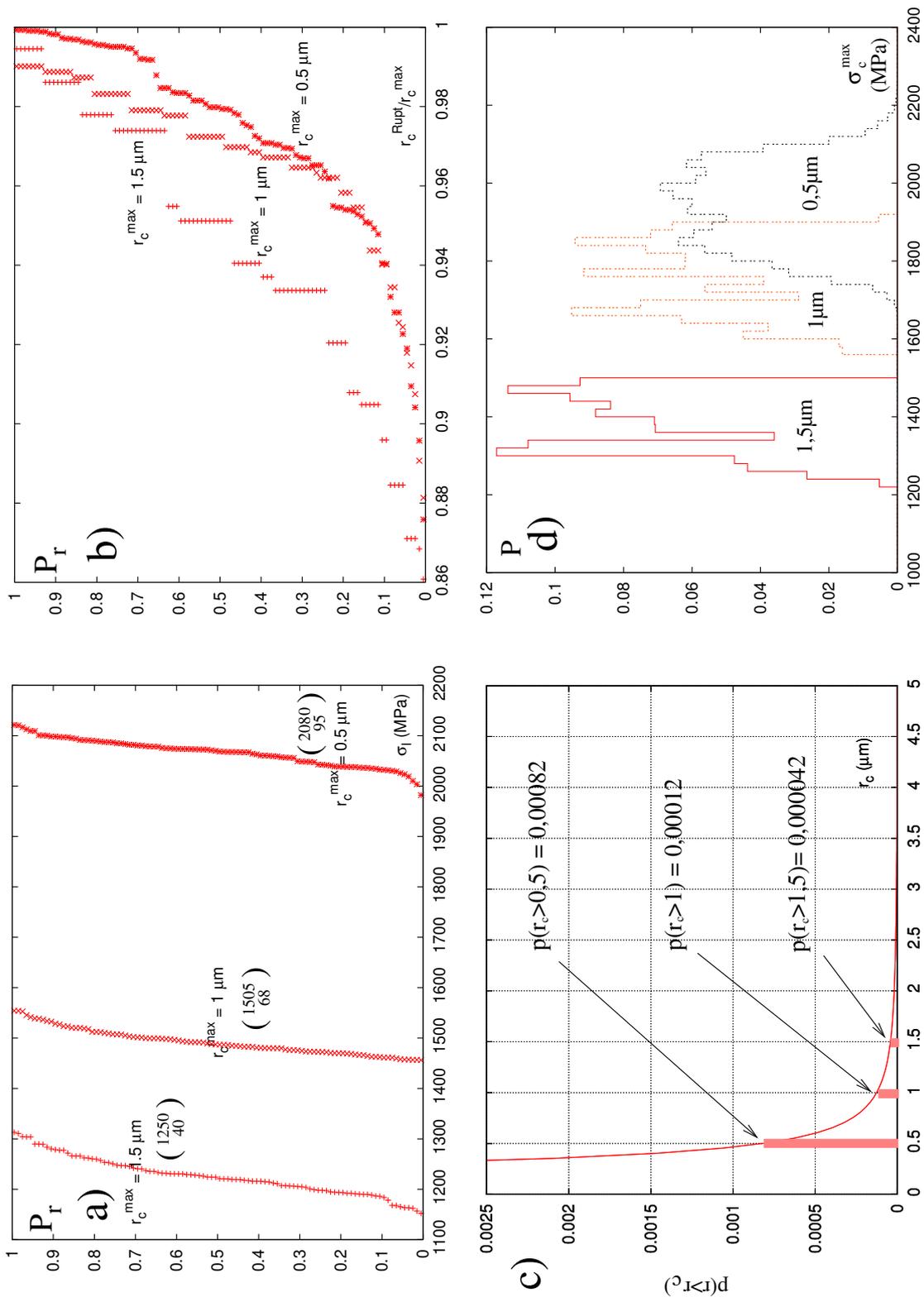


FIG. V.26 – Effet de tailles de carbures : représentation pour le calcul T3 ($T=-150^{\circ}\text{C}$, $\chi=3$). Les paramètres sont les suivants : $\epsilon_p^{mini}=10^{-5}$, $\gamma_p = 6.5 \text{ J.m}^{-2}$. a) Probabilité de rupture cumulée en fonction de r_c^{max} , b) taille du carbure r_c^{rupt} ayant provoqué la rupture. Les tailles de carbures ont été réorganisées, la rupture à plus faible contrainte macroscopique ne correspondant pas forcément au plus gros carbure, c) probabilité de trouver un carbure de taille supérieure où égale à une taille donnée, d) histogrammes de la contrainte effective maximale sur les plans de clivage σ_c^{max} pour une probabilité de rupture cumulée d'environ 0,632.

donne un rayon maximal observé de $0,4 \mu\text{m}$, mais utilise un r_c^{max} de $2 \mu\text{m}$ pour l'acier euro 'A'. Pour sa part, Haušild [Hausild, 2002] considère une taille de particule à l'origine du clivage de rayon $r = 1 \mu\text{m}$ pour cet acier.

On prendra ici une valeur limite r_c^{max} de $1 \mu\text{m}$. Cette valeur est donc cohérente avec les données de la littérature.

c) Sensibilité des paramètres de Weibull à l'énergie de surface équivalente.

Influence de l'énergie de surface : On observe une très forte dépendance des paramètres de la distribution de Weibull calée sur la probabilité de rupture cumulée pour le calcul T2 vis-à-vis de l'énergie effective γ_p . L'augmentation de l'énergie équivalente augmente le niveau de contrainte moyen requis pour la rupture, ce qui explique simplement l'évolution de σ_u . La dispersion des contraintes σ_c^{Max} augmente alors elle aussi avec σ_u (voir plus loin la figure V.30.d), amenant une plus grande dispersion de Σ_I à rupture, et donc une augmentation de m .

Dépendance en température de γ_p utilisée : On dispose de plusieurs données plus ou moins récentes au sujet de la valeur de γ_p . Il semble toutefois indispensable ici pour décrire l'effet de la température sur la rupture de considérer un γ_p dépendant de la température, toutes choses égales par ailleurs.

Cela nous place donc devant des difficultés pour reprendre les résultats des travaux précédents. Ceux-ci s'étendent bien souvent sur une plage de température très étendue, et certains auteurs [Hahn, 1984] ne considèrent aucune dépendance en température.

Afin d'utiliser de manière pragmatique le peu d'informations disponibles, nous allons nous baser sur l'ensemble des travaux récapitulés précédemment (cf figure V.12), et sur plusieurs hypothèses :

- On considérera une évolution de γ_p semblable à celle proposée dans [Wallin et al., 1984]. Toutefois, seule la forme de celle-ci est conservée, les valeurs identifiées par Wallin ne correspondant pas à l'acier 16MND5. La forme de $\gamma_p = f(T)$ est donc connue (voir équation 5.38), reste à déterminer les valeurs des paramètres.
- Les valeurs relevées récemment dans la littérature allant de 7J.m^{-2} [Ortner et al., 2005] à 12.4J.m^{-2} [Im et Lee, 2004], on considérera ces valeurs comme les bornes supérieure et inférieure pour l'application au seul mécanisme de clivage. Le clivage étant par ailleurs généralement considéré comme actif et étudié sur la plage de températures allant de -150°C (voire -196°C) à -60°C (entrée de la transition), on attribuera à ces températures respectivement la valeur basse et haute de l'énergie de surface γ_p .
- Enfin, on considérera comme Wallin qu'à 0°K (-273.5°C), la propagation ne fait intervenir que la cohésion pure du réseau cristallin, sans effet de la composante liée à l'activité plastique, soit une valeur de 3.9J.m^{-2} (en considérant que la différence entre aciers modifie très peu la composante athermique de l'énergie de surface).

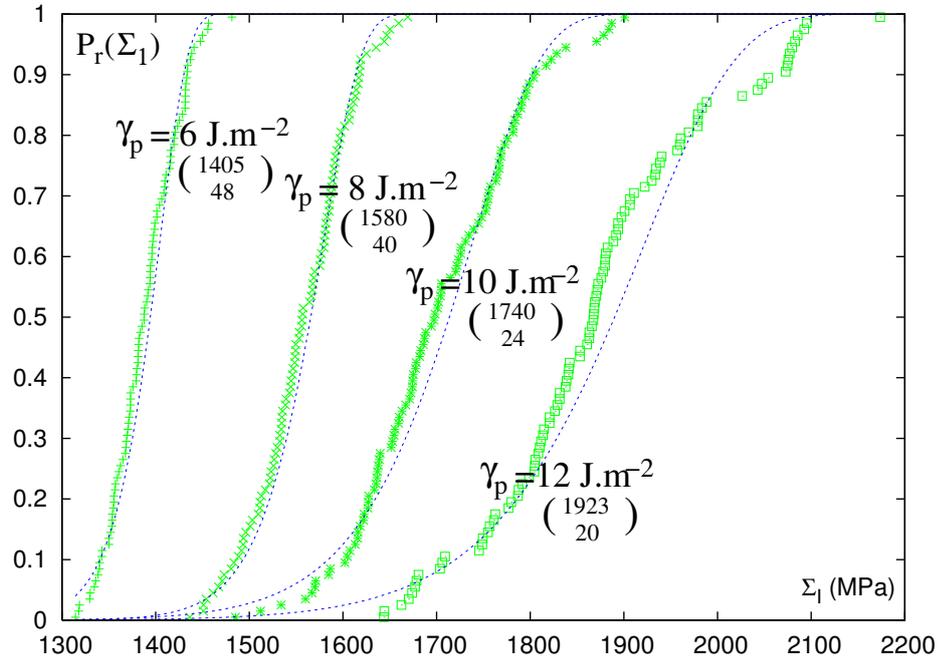


FIG. V.27 – Influence de γ_p sur les paramètres m et σ_u déterminés pour le calcul T2 ($\chi=1.75$, $T=-150^\circ\text{C}$) ; $\epsilon_p^{mini}=10^{-5}$, $r_c^{max}=1\mu\text{m}$.

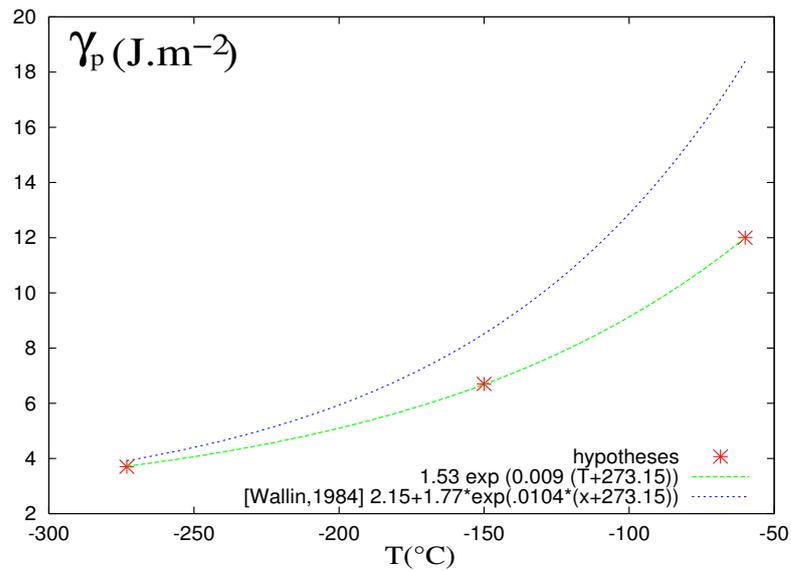


FIG. V.28 – Dépendance en température de γ_p utilisée dans ces travaux, et comparée à celle utilisée par Wallin pour un autre acier.

En utilisant à nouveau le module d'optimisation de fonction du logiciel Gnuplot, on obtient la dépendance en température suivante :

$$\gamma_p^\alpha = 2,15 + 1,53 \cdot e^{0,009 \cdot T} \quad (5.65)$$

Il est bien évident que ce calage reste approximatif et que les considérations faites sont discutables. Néanmoins, l'allure de l'évolution de l'énergie de surface en fonction de la température, ainsi que ces valeurs sont tout à fait semblables et du même ordre de grandeur que celles qu'on utilise habituellement : les coefficients trouvés sont du même ordre de grandeur que ceux utilisés par Wallin.

Dans notre cas la ferrite est globalement moins tenace (figure V.28) que l'acier considéré par Wallin. Dans les présents travaux on distingue la contrainte dans la ferrite qui sera moins élevée que la contrainte macroscopique, ce qui explique une valeur plus faible de l'énergie de surface.

V.3.5 Comparaison de la démarche utilisée avec des données expérimentales

A titre comparatif, nous utiliserons le jeu de paramètres déterminés dans ces travaux pour l'étude de la probabilité de rupture d'un volume soumis à une triaxialité de $\chi = 1,75$ (calcul T2).

Les paramètres de Weibull identifiés sur la probabilité de rupture cumulée obtenue grâce au post-traitement sont comparées aux valeurs présentées par Carassou [Carassou, 1999]. Celles-ci proviennent du calage du modèle de Beremin pour la rupture d'éprouvettes axisymétriques entaillées à -150°C . Cette température permet de s'assurer que c'est bien le clivage qui pilote la rupture de l'éprouvette. D'autre part, les valeurs de triaxialités indiquées dans [Rossol, 1998] montrent que la triaxialité au point de rupture est comparable à la valeur de $\chi = 1,75$.

Par ailleurs, nous n'utiliserons que ce jeu de résultats. La plupart des jeux de paramètres identifiés dans les autres travaux le sont avec des modèles de comportement qui prennent en compte une modélisation de l'endommagement, ce qui n'a pas été fait dans cette étude.

On rappelle (voir V.2.3.b)) que les paramètres pertinents pour un matériau donné sont $\sigma_u V_0^{1/m}$ et m . Les résultats sont les suivants :

	[Carassou, 1999], AE2-6	Post calcul T2
σ_u	3000 ± 140	1467
m	20 ± 8	36
$\sigma_u V_0^{1/m}$	680	642

Comme indiqué précédemment, la comparaison porte essentiellement sur $\sigma_u V_0^{1/m}$, et les résultats sont très bons sur cette variable. Il faut rappeler à ce stade qu'aucun calage n'a été réalisé en dehors des hypothèses du modèle présentées précédemment. Ce bon résultat valide la démarche.

V.3.6 Effet du chargement sur les paramètres de Weibull

a) Effet de la température

La figure V.29.a présente les résultats du post-traitement appliqué aux simulations T1, T5, T6 et T7 à différentes températures en prenant en compte la dépendance de γ_p en température. Les distributions de la contrainte maximale sur les plans de clivage σ_c^{max} aux points d'intégration pour une valeur de contrainte principale proche de σ_u sont données en figure V.29.b. On constate une dépendance significative des paramètres m et σ_u en température (figure V.29.c).

Les résultats à -60°C sont tronqués, car la simulation n'a pas pu être menée à son terme pour raison technique.

L'augmentation de σ_u avec la température est à relier à l'évolution de γ_p , qui augmente la contrainte de Griffith à même de provoquer la rupture. Si la contrainte principale moyenne à rupture σ_u augmente, on constate aussi un élargissement de la distribution des contraintes maximales sur les plans de clivage qui explique la diminution de m (i.e. l'augmentation de la dispersion de Σ_I avec l'augmentation de la température).

Afin de dissocier l'effet de la dépendance de γ_p en température et l'effet de la variation du comportement en température, la même démarche a été adoptée, tout d'abord avec γ_p constant, voir figure V.30.a et b, puis en ne faisant varier que l'énergie de surface équivalente pour la même simulation T1 avec $\gamma_p = f(T)$, voir figure V.30.c et d.

Les résultats indiquent clairement que la différence de comportement en température ne suffit absolument pas à expliquer une variation des paramètres m et σ_u . Cela s'explique simplement par l'observation de la figure V.30.a : Pour une même contrainte principale moyenne Σ_I proche de la valeur de σ_u (alors quasi commune aux quatre températures), la dispersion de la contrainte maximale sur les plans de clivage σ_c^{max} varie peu.

A l'inverse, une simple dépendance de γ_p en température permet de capter l'évolution des paramètres m et σ_u , tout en utilisant une seule et même simulation. Bien que l'évolution de γ_p ne soit pas exactement la même, on rapproche immédiatement les figure V.30.c et d des figures V.29.a et b.

Ce résultat indique que l'explication de l'évolution des paramètres m et σ_u ne doit pas être recherchée en observant la répartition des champs pour une même contrainte moyenne Σ_I donnée. L'effet de σ_u avec l'augmentation de la température est d'augmenter le niveau moyen de contrainte à rupture. C'est donc bien les dispersions autour des contraintes donnant une même probabilité de rupture qui doivent être comparées entre les différentes températures (ce qui est montré à la figure V.29.b). Cet effet est donc plutôt à rapprocher de l'évolution de l'énergie de surface équivalente γ_p que de l'évolution de la limite élastique parfois proposée ([Bordet et al., 2005]).

L'effet sur m (sur la dispersion de σ_c^{max}) de l'augmentation de σ_u est ici relativement important puisqu'aux basses températures, la rupture intervient alors que les hétérogénéités de contraintes ne sont pas encore très marquées, pour des niveaux de déformation plastique

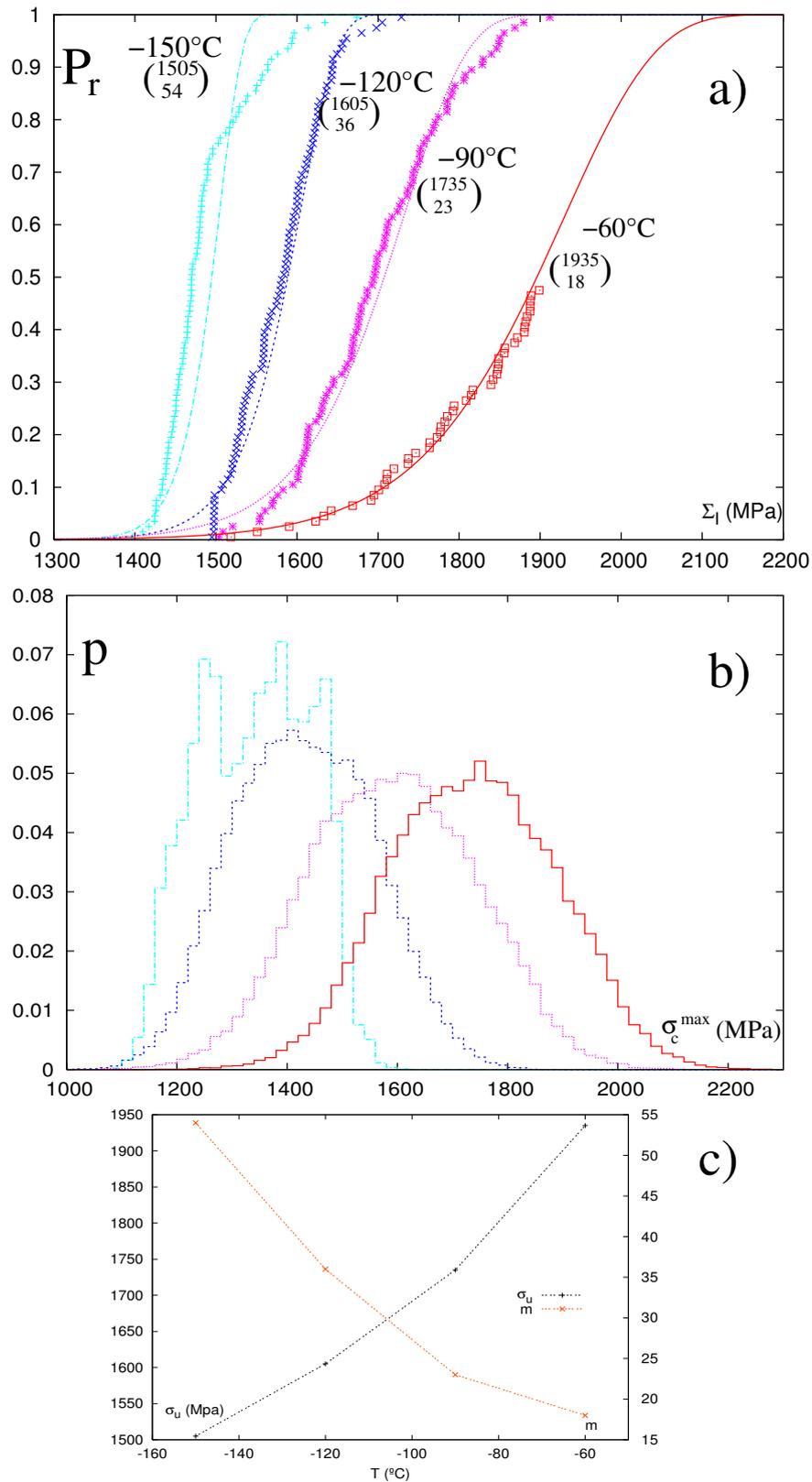


FIG. V.29 – Dépendance en température : simulations à différentes températures post-traitées avec $\gamma_p = f(T)$. a) Probabilité de rupture cumulée, b) Distribution de la contrainte maximale sur les plans de clivage pour Σ_I proche de σ_u . c) Évolution des paramètres m et σ_u avec la température.

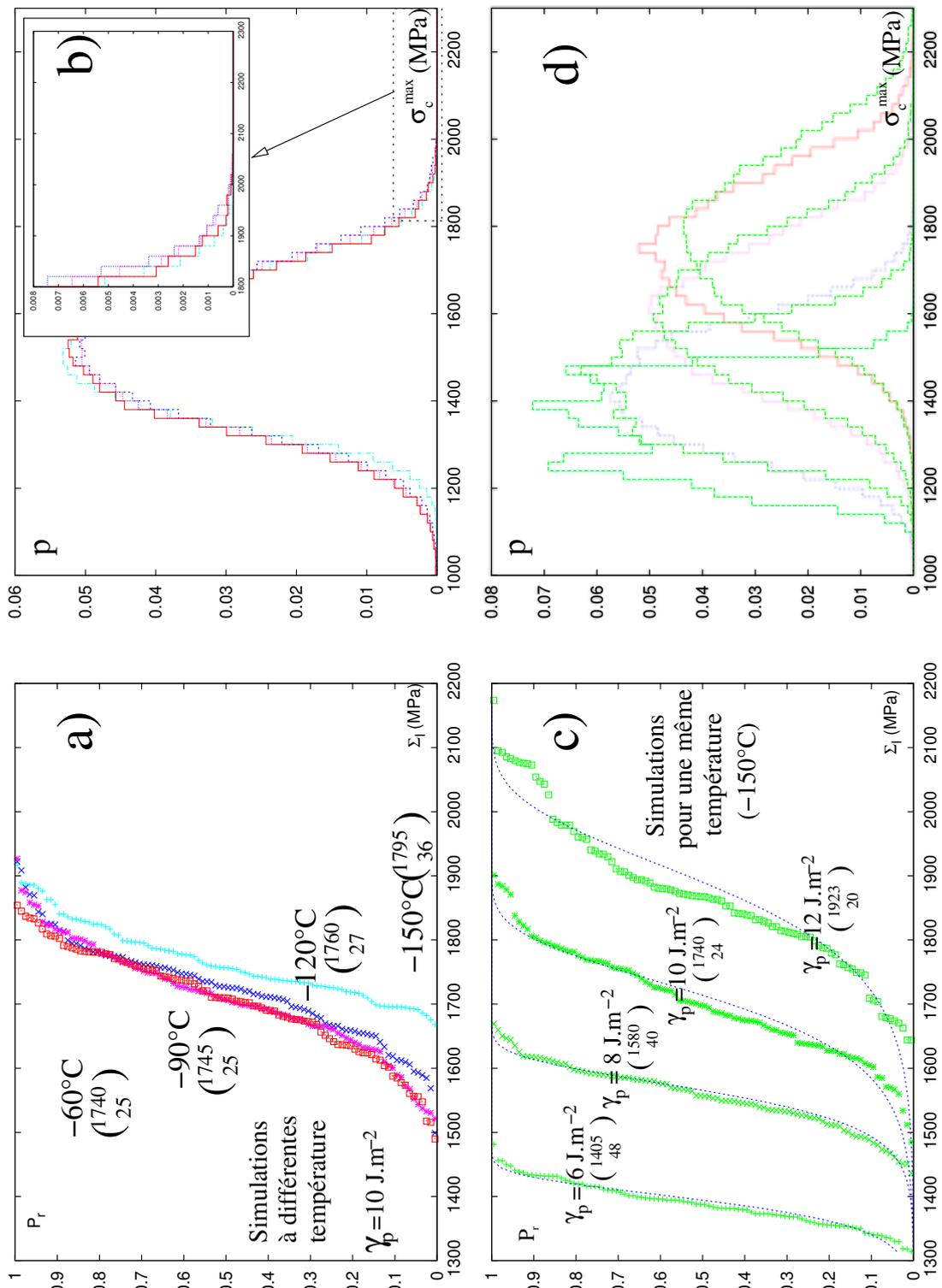


FIG. V.30 – Illustration du rôle de γ_p sur les paramètres m et σ_c : a) identifications pour γ_p constant sur les simulations à différentes températures (T1, T5, T6 et T7) et b) distributions de la contrainte maximale sur les plans de clivage, c) identifications pour une seule température (simulation T1) en faisant varier γ_p (idem figure V.27), et d) distribution de la contrainte sur les plans de clivage pour la même simulation à -150°C (à titre de comparaison, les distributions de la figure V.30.b ont été ajoutées en transparence).

relativement faibles. La figure IV.32 du chapitre III montrait bien que les hétérogénéités de contraintes ne se développent pas immédiatement.

En supposant une énergie de surface γ_p plus élevée, on aurait une moins grande sensibilité de m à la température. La rupture interviendrait pour des niveaux de déformation plastique plus élevés pour toutes les températures ce qui donnerait des dispersions de σ_c^{max} autour de la valeur moyenne comparables entre les différentes températures, et donc une évolution de m moins significative.

Dans ses travaux, Haušild propose d'établir une dépendance en température de m et σ_u , en se basant sur une approche inverse entre -90°C et -30°C , c'est-à-dire dans la transition. Comme dans la plupart des autres travaux portant sur la transition, il considère l'endommagement du matériau. Il note par ailleurs que la seule dépendance en température de σ_u ne permet pas de décrire correctement la dispersion dans la transition.

Les résultats obtenus ici en termes de contrainte σ_u ne sont pas du même ordre de grandeur que les siens. Néanmoins, on peut constater sur la figure V.31.a (représentée avec deux échelles en ordonnée) que l'évolution avec la température de σ_u suit une tendance tout à fait correcte. Du point de vue de l'évolution de m (figure V.31.b), les résultats sont par contre tout à fait comparables.

Ce résultat est plus qu'encourageant : l'approche micromécanique de la rupture déroulée précédemment et prévue pour les basses températures permet, sans ajuster de paramètres, de reproduire l'évolution des paramètres σ_u et m pour les températures de la transition, à condition de considérer un chargement avec une triaxialité correspondant à une pointe de fissure ductile. Ce bon accord peut s'expliquer notamment par le fait que les simulations de Haušild mettent en évidence une triaxialité χ de l'ordre de 2 en pointe de fissure, ce qui est aussi la valeur considérée dans les présents travaux pour étudier la dépendance en température.

La démarche mise en place n'est valable *a priori* qu'aux basses températures pour une rupture par clivage sans autres phénomènes d'endommagement. La figure V.32 présente la probabilité de rupture cumulée exprimée en fonction de la déformation plastique équivalente locale au point d'intégration qui a cassé, mais aussi de la déformation plastique équivalente macroscopique.

La courbe à -60°C n'est pas représentée, car dès -90°C , on se rend bien compte qu'on atteint des déformations plastiques tout à fait importantes, et très certainement trop importantes pour une description de la rupture par le seul mécanisme du clivage amorcé sur particules de seconde phase.

La première observation est que le niveau de déformation plastique à rupture local est toujours plus élevé que le niveau macroscopique, ce qui semble normal. La rupture nécessite une forte contrainte ce qui passe par une plus forte déformation plastique permettant l'élévation de la contrainte (en n'oubliant pas qu'il faut aussi un défaut de taille suffisante).

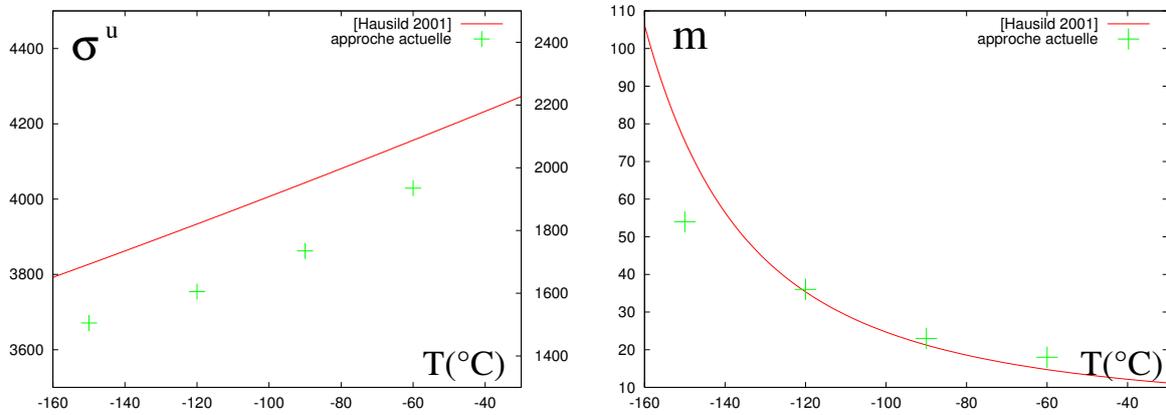


FIG. V.31 – Comparaison de la dépendance en température prévue par l’approche micromécanique des paramètres m et σ_u avec la dépendance identifiée sur des essais entre -90°C et -30°C [Hausild, 2002]. Pour σ_u les deux échelles sont différentes, seule la tendance est comparable.

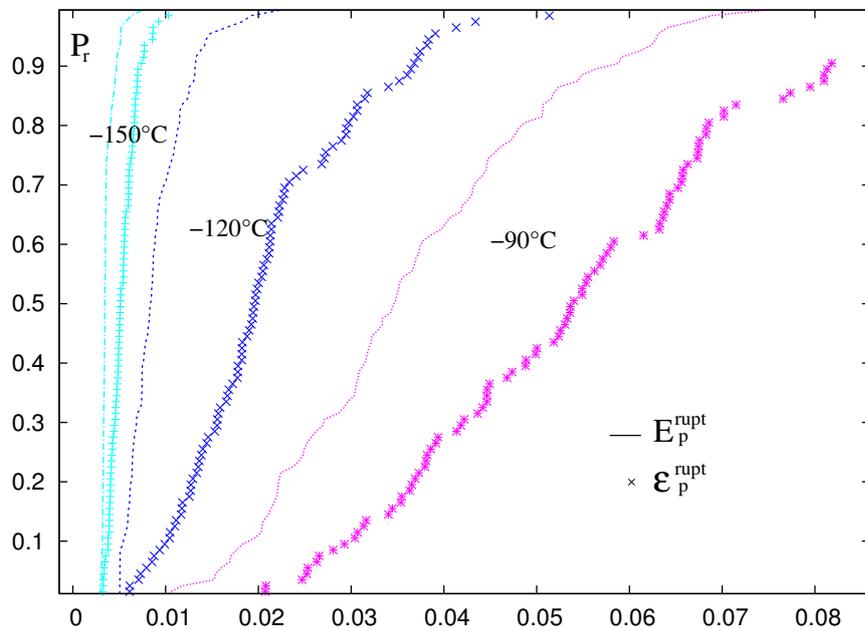


FIG. V.32 – Probabilité de rupture cumulée en fonction de la déformation plastique locale au point de rupture et de la déformation plastique macroscopique. Les fortes déformations locales ne correspondent pas forcément aux plus fortes contraintes à rupture, car elles ont été reclassées.

Par contre, les résultats aux températures plus basses semblent indiquer des niveaux de déformation plastique raisonnables pour une rupture par clivage. Ces constatations ne se font toutefois que pour une triaxialité $\chi=2$ qui n'est pas la plus sévère étudiée.

Toutefois la cohérence des résultats en termes de module m avec ceux identifiés par Haušild permet de supposer que si les mécanismes d'endommagement évoluent (apparition d'un couplage avec une fissure ductile), ils n'influencent pas directement sur la dépendance en température de la rupture par clivage, mais plutôt sur les champs mécaniques locaux. Il faut donc chercher un effet de la triaxialité sur les probabilités locales de rupture pour estimer comment ces travaux peuvent être transposés au cas de la transition fragile-ductile.

b) Effet de la triaxialité χ

L'effet de la triaxialité du chargement χ est présenté à la figure V.33. L'augmentation de la triaxialité induit une augmentation assez forte du paramètre m . L'effet est plus limité sur la contrainte σ_u (figure V.33.b). Ces deux effets s'expliquent là encore en observant l'évolution de la distribution des contraintes maximales sur les plans de clivage σ_c^{max} pour un niveau de contrainte moyen σ_u .

La figure V.33.c montre la répartition de ces contraintes pour une même première contrainte principale Σ_I correspondant à la contrainte σ_u . On constate un resserrement de ces contraintes pour les plus fortes triaxialités qui explique facilement l'évolution de m .

La figure V.33.c permet aussi d'expliquer l'effet sur σ_u . Le resserrement de la distribution de la contrainte σ_c^{max} avec l'augmentation de la triaxialité s'accompagne pour un même niveau de contrainte Σ_I d'un "recul" de la queue de distribution qui entraîne une augmentation σ_u , malgré une augmentation de la valeur moyenne de la distribution de σ_c^{max} .

Ce résultat doit toutefois être nuancé. Si l'on augmente l'énergie de surface équivalente γ_p (par exemple pour les plus hautes températures), l'observation des figures V.33.d et e montre que la tendance pourrait s'inverser en ce qui concerne la dépendance de σ_u en triaxialité : en considérant des niveaux de contraintes moyens plus élevés, le resserrement de la distribution de la contrainte σ_c^{max} amène les queues de distributions de contraintes à se croiser (figures V.33.d puis e).

En considérant l'évolution de la température, on pourrait donc voir l'évolution de σ_u avec la triaxialité comme le résultats de la compétition entre l'effet du resserrement de la dispersion d'une part et l'effet de l'augmentation du niveau de chargement moyen d'autre part, tous deux dus à l'augmentation de triaxialité. Ce résultat indique qu'une étude de l'effet de la triaxialité croisée avec l'effet de la température serait tout à fait pertinente.

c) Effet de la pression relative ζ .

L'effet de la pression relative ζ sur la rupture est présenté à la figure V.34.a. On ne constate pas d'effet notable sur m (figure V.34.b). Par contre l'effet sur la contrainte σ_u n'est

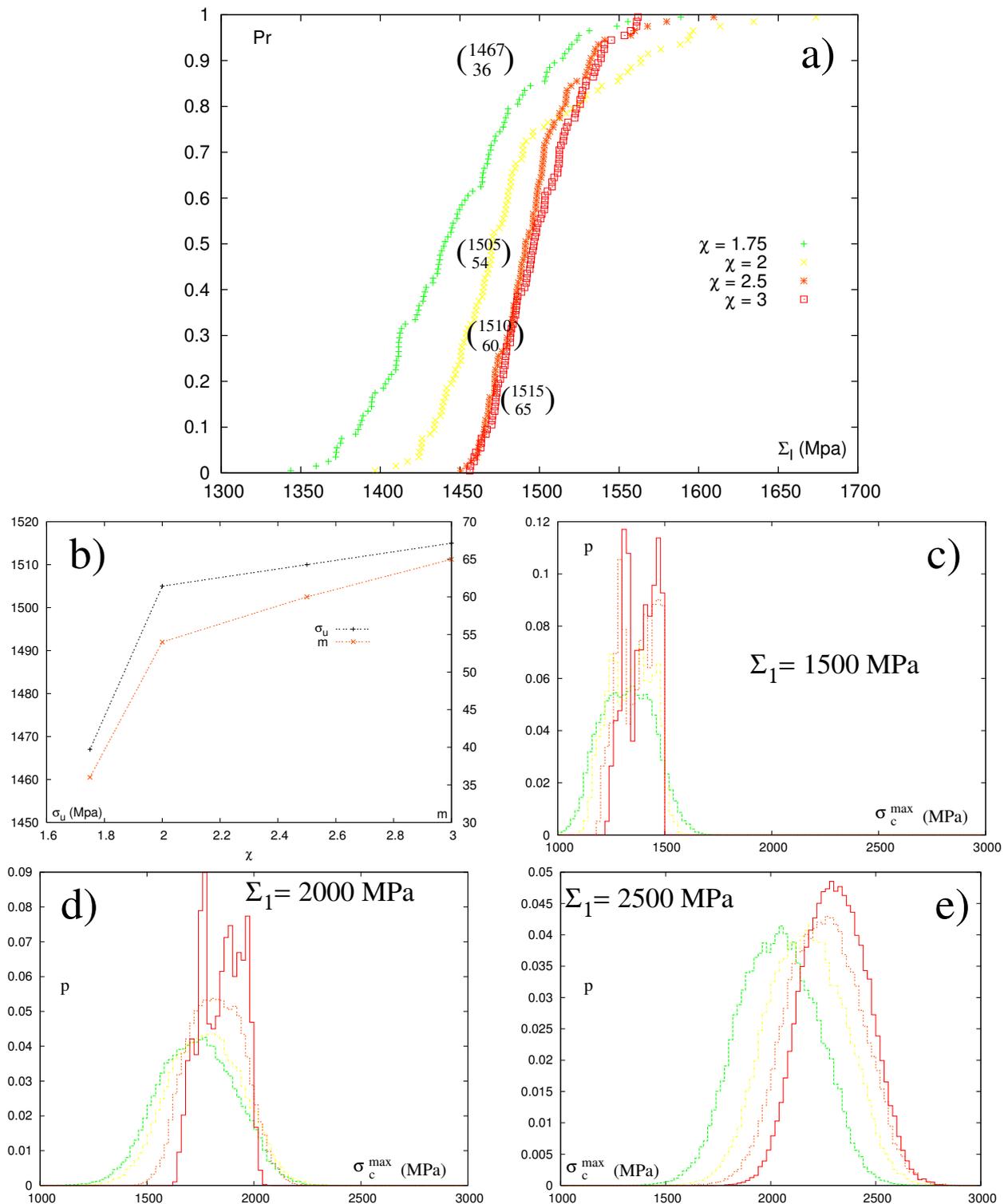


FIG. V.33 – a) Probabilité de rupture cumulée du en fonction de la triaxialité et b) dépendance à la triaxialité des paramètre m et σ_u pour une température de -150°C . Les distributions de des contraintes σ_c^{max} sont indiquées : c) pour une contrainte principale macroscopique proche des valeurs de σ_u , d) et e) pour des contraintes supérieures afin d'illustrer que l'effet sur σ_u de la triaxialité dépend lui même du niveau de contrainte atteint.

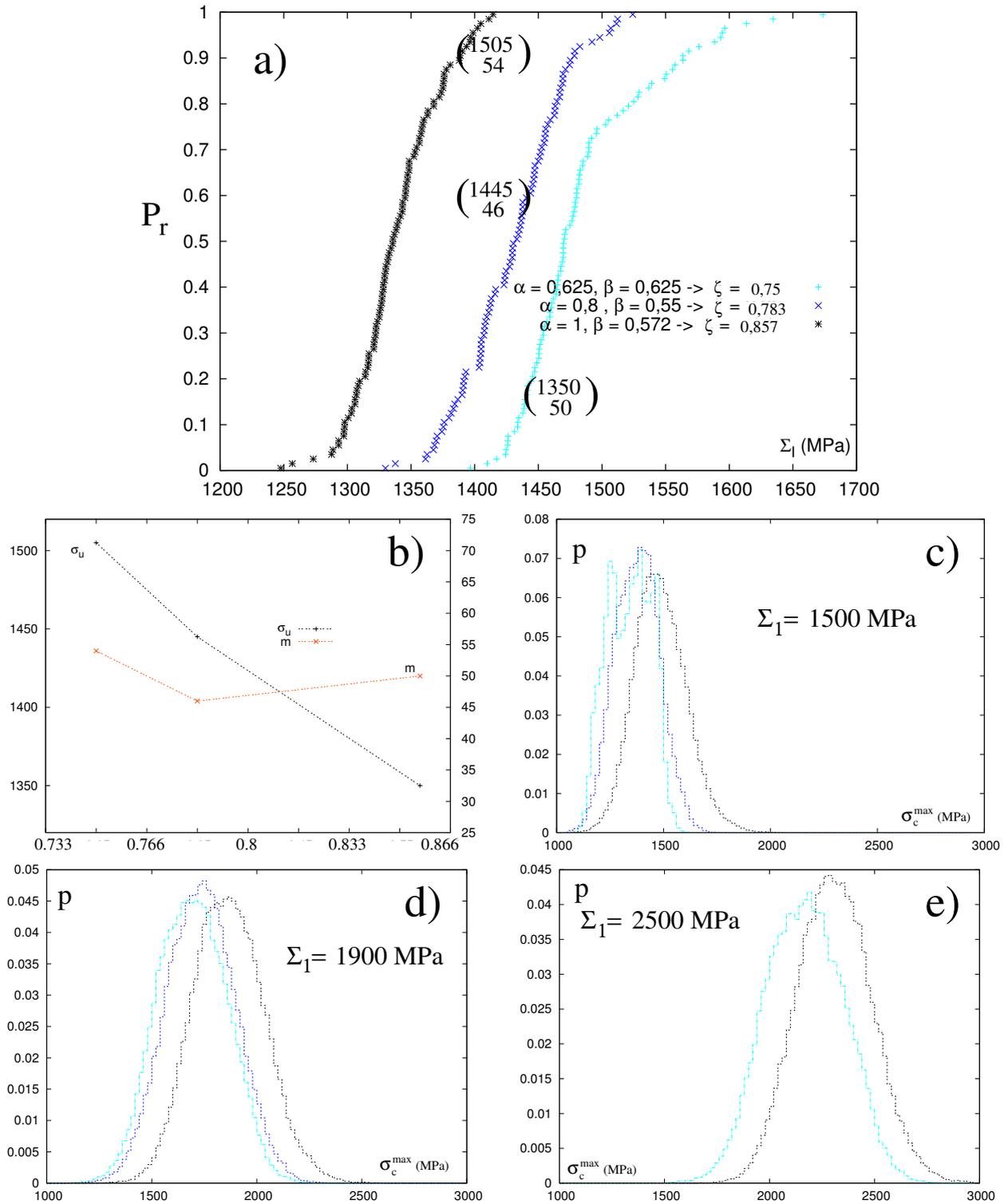


FIG. V.34 – a) Effet de la pression relative ζ sur la probabilité de rupture cumulée pour une température de -150°C , b) évolution des paramètres m et σ_u . Représentation de la distribution des contraintes maximales sur les plans de clivages pour une valeur de contrainte moyenne proche de σ_u . d) *idem* pour une contrainte moyenne de 1900 et e) 2500 MPa.

pas négligeable, et s'interprète directement en termes d'effet sur la valeur moyenne de la contrainte maximale sur les plans de clivage, dont la dispersion ne varie que peu avec ζ .

Contrairement à l'effet de la triaxialité, l'effet de la pression relative est visible quelque soit le niveau de première contrainte principale atteint (figures V.34.c, d et e), puisqu'il n'y a pas d'effet croisé sur m et σ_u . Cet effet n'est toutefois pas aussi significatif que les effets cités précédemment.

V.3.7 Discussion

Les résultats obtenus sont récapitulés à la figure V.35. La première remarque concerne les valeurs obtenues pour la contrainte σ_u . Dans l'ensemble, on constate que les valeurs trouvées ici sont inférieures aux valeurs usuellement obtenues. Il est probable qu'une reprise de la démarche complète avec des valeurs d'énergie équivalentes suivant la même évolution en température mais plus éloignées des données disponibles, voire l'utilisation d'une distribution de taille de défauts qui ne présente pas les problèmes liés à l'utilisation d'une taille maximale de carbures pourraient conduire à des valeurs de σ_u plus usuelles.

Toutefois, on peut aussi se poser la question du sens physique de certaines de ces valeurs usuelles très élevées (jusqu'à 3000 MPa pour σ_u), qui d'après nos résultats sont nécessairement associées à des fortes déformations plastiques, non compatibles avec un mécanisme de clivage sans couplage avec un endommagement ductile.

Il n'en reste pas moins que les différents effets de la température et du chargement mis en évidence gardent leur caractère prédictif : on rappelle que la méthodologie ne s'est fondée sur aucune hypothèse *a priori* sur l'évolution du comportement à rupture avec la température et le chargement, mais que ces effets sont mis en évidence grâce à la nature micromécanique et multi-échelles de la modélisation.

a) Conséquences pour la modélisation de la rupture fragile et prise en compte de la température

Ces travaux ont donc plusieurs conséquences sur la vision que l'on peut avoir d'une modélisation de la rupture fragile avec un modèle d'approche locale de type Beremin. La tendance actuelle des travaux sur la rupture fragile dans l'entrée dans la transition semble être de poser la question d'une dépendance des paramètres m et σ_u en température, voire de proposer une formulation permettant de pondérer la contrainte principale (correction de plasticité, prise en compte de la limite d'élasticité) afin d'expliquer la dépendance en température.

Pour ce qui est de cette question, ces travaux indiquent clairement que la dépendance en température des paramètres m et σ_u est à relier directement à celle de l'énergie équivalente, et donc du niveau de contrainte moyen à probabilité de rupture identique. La prise en compte de cette dépendance semble un passage obligatoire pour l'application du modèle de Beremin sur une gamme de température relativement étendue. Le domaine de validité

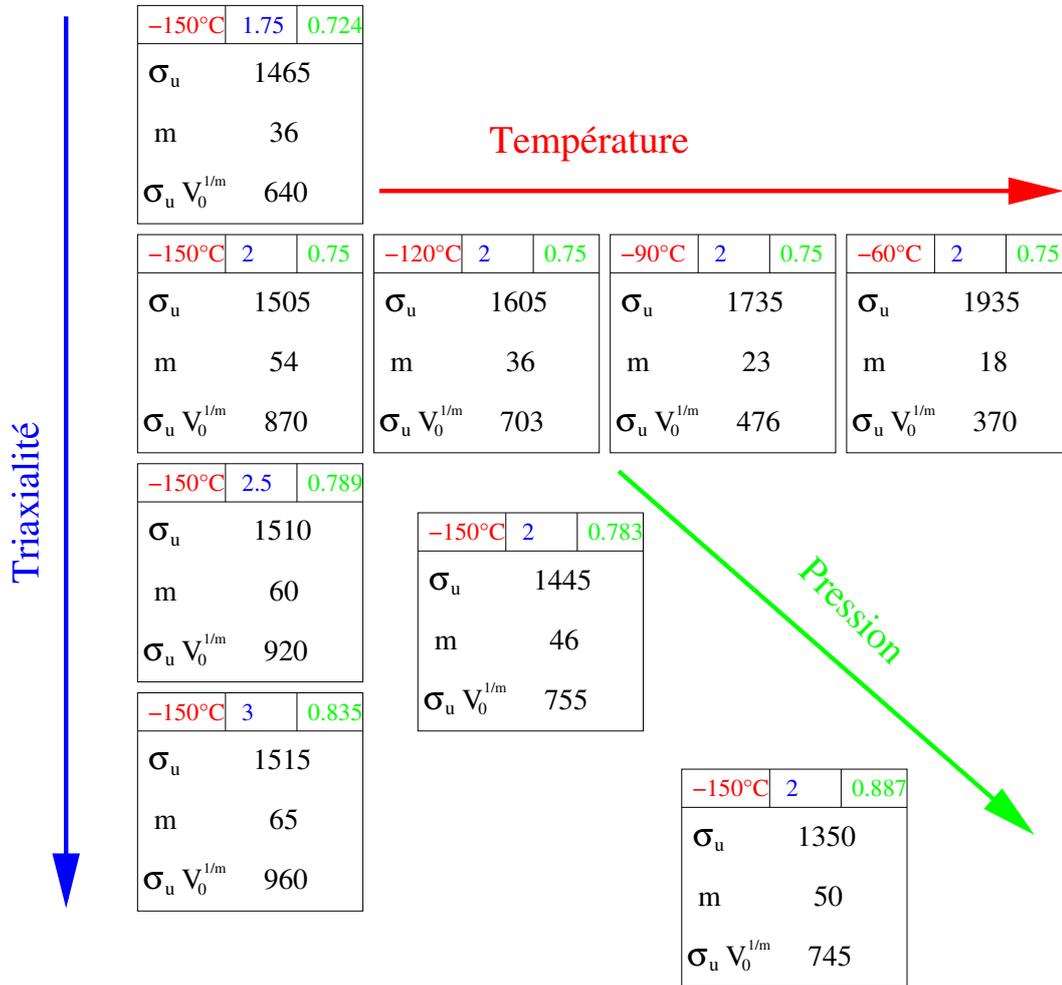


FIG. V.35 – Récapitulatifs des tendances observées pour m et σ_u dans ces travaux, en fonction de la température T , de la triaxialité χ et de la pression relative ζ .

d'une approche locale "purement fragile" de la rupture semble toutefois se limiter aux très basses températures, ce qui d'ailleurs est le domaine premier d'application prévu de ce type d'approche [Beremin, 1983].

La prise en compte d'une correction de déformation plastique qui est proposée dans de nombreux travaux, ne semble pas nécessairement la seule voie pour représenter l'effet de la température sur la rupture fragile. L'effet de la résistance à la propagation et donc de l'énergie de surface, qui varie avec la température paraît être le critère pertinent. Il permet de prédire une évolution de la dispersion en accord avec les travaux expérimentaux, bien que le niveau moyen de contrainte à rupture prédit par la présente approche reste à améliorer.

D'un autre côté, on montre dans ces travaux une très forte dépendance à la triaxialité de la rupture fragile, qui n'est que peu prise en compte à l'heure actuelle. Les modélisations

mixtes “fragile-ductile” permettent de rendre compte de l’évolution du chargement en termes de triaxialité voire de pression relative. Reste à utiliser cette information de manière pragmatique.

b) Évolution de la rupture fragile avec la triaxialité

La forte dépendance en triaxialité prévue par le modèle proposé dans ce document devrait être prise en compte dans l’approche locale de la rupture fragile. Ces travaux montrent par ailleurs que la première contrainte principale n’est pas suffisante pour décrire la rupture fragile. Deux voies sont donc envisageables :

- La première voie consiste à conserver une approche se basant sur la statistique de Weibull, rapportée à la première contrainte principale, et à faire évoluer les paramètres m et σ_u afin de rendre compte de leur évolution en fonction de la température et du chargement.
- La seconde voie, qui reste à tracer serait de trouver une quantité (qu’on suppose liée aux trois contraintes principales) qui permettrait d’unifier la dépendance au chargement. La formulation conservant par ailleurs la dépendance en température.

Une fois l’une de ces voies tracées, il serait intéressant de reprendre une identification sur différentes géométries menant à différentes triaxialités et pour différentes températures, tout en se basant sur une description du comportement à même de bien rendre compte de l’évolution de l’endommagement. C’est globalement le type de démarche qui a cours actuellement, l’apport essentiel des travaux présentés ici étant de le justifier par une démarche micromécanique, et de démontrer l’importance de la prise en compte de la triaxialité.

En conclusion

- *L'étude bibliographique des travaux portant sur l'étude de la rupture fragile des aciers a porté sur différents aspects. Elle a tout d'abord permis de dégager les aspects physiques à l'échelle microscopique de la rupture par clivage des aciers. Partant des divers résultats expérimentaux et des connaissances actuelles sur la rupture fragile, elle a permis de dégager la propagation de défauts amorcés en cours de déformation plastique comme étant le mécanisme critique pour la rupture des aciers de cuve à basses températures. Par ailleurs les différentes grandeurs associées à la description microscopique de ce phénomène ont été répertoriées. Dans un deuxième temps, un bilan des approches locales a permis de montrer le manque relatif de nouveauté apporté depuis l'approche de Beremin qui reste le socle des différentes modélisations. Un autre manque est mis en évidence : celui d'une approche qui unifierait les considérations microscopiques sur la rupture et leur traduction dans l'approche locale.*
- *Une démarche micromécanique originale a été proposée afin de palier ce manque. En se basant sur le calcul d'agrégat développé précédemment, elle permet de déterminer la probabilité de rupture d'un volume élémentaire en se basant sur un critère déterministe de clivage appliqué pour différentes réalisations de distributions de tailles de défauts, et couplé à l'hypothèse du maillon le plus faible. Le volume élémentaire considéré est par ailleurs de taille comparable au volume élémentaire de l'approche locale. C'est la bonne description des dispersions de contrainte locale en cours de déformation plastique (qui résulte de l'effort consenti lors de la phase de modélisation du comportement), couplée à la dispersion des tailles de défauts qui explique la dispersion de la contrainte à rupture du volume considéré.*
- *L'application de cette démarche pour une série de chargements représentatifs a permis de démontrer plusieurs effets du chargement sur la probabilité de rupture cumulée du volume élémentaire. Ainsi, en se basant sur les données de la littérature, on reproduit la dispersion de contrainte à rupture du volume élémentaire postulé par l'approche locale, sans effectuer de calage de paramètre d'aucune sorte. Malgré quelques difficultés liées à l'aspect totalement prédictif, la dépendance en température de la rupture tirée de l'expérience est bien reproduite, et surtout peut être expliquée grâce à la richesse des données accessibles par l'approche micromécanique. On quantifie de plus une dépendance significative à la nature triaxiale du chargement, qui n'avait pas trouvée de démonstration probante jusqu'ici. L'ensemble de ces considérations amène à proposer une vision de ce que devrait être l'approche locale de la rupture fragile dans le cadre de la prévision de la dispersion de la ténacité de l'acier de cuve aux basses températures ainsi que dans la*

transition fragile-ductile. Une prise en compte de l'endommagement, couplée à une meilleure représentation des effets de température et de triaxialité semble être une voie prometteuse.

Bibliographie

- [Beltz et Machová, 2004] BELTZ G. E. ET MACHOVÀ A. (2004). *Micromechanical modeling of ductile damage of polycrystalline materials with heterogeneous particles*. Int. J. Plasticity, vol. 20, pp 85–106.
- [Beremin, 1983] BEREMIN F.M. (1983). *A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel*. Metall. Trans. A, vol. 14, pp 2277–2287.
- [Bernauer et al., 1999] BERNAUER G., BROCKS W., ET SCHMITT W. (1999). *Modification of the Beremin model for cleavage fracture in the transition region of a ferritic steel*. Eng. Frac. Mech., vol. 64, pp 305–325.
- [Bhadeshia et Honeycombe, 2006] BHADESHIA H.K.D.H ET HONEYCOMBE R.W.K. (2006). *Steels - Microstructures and Properties*. Butterworth-Heinemann.
- [Blonski et Kiejna, 2004] BLONSKI P. ET KIEJNA A. (2004). *Calculation of surface properties of BCC iron*. Vacuum, vol. 74, pp 179–183.
- [Bordet et al., 2005] BORDET S.R., KARTENSEN A.D., KNOWLES D.M., ET WIESNER C.S. (2005). *A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part I : model presentation*. Eng. Frac. Mech., vol. 72, pp 435–452.
- [Bouyne et al., 1998] BOUYNE E., FLOWER H.M., LINDLEY T.C., ET PINEAU A. (1998). *Use of EBSD technique to examine microstructure and cracking in a bainitic steel*. Scripta Mater., vol. 39, pp 295–300.
- [Brozzo et al., 1978] BROZZO P., BUZZICHELHI G., MANSCANZONI A., ET MIRABILE M. (1978). *Microstructure and cleavage resistance of low-carbon bainitic steels*. Met. Sci., vol. 11, pp 123–129.
- [Bugat, 2000] BUGAT S. (2000). *Comportement et endommagement des aciers austéno-ferritiques vieillis : une approche micromécanique*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Carassou, 1999] CARASSOU S. (1999). *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : Rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Cottrell, 1958] COTTRELL A.H. (1958). *Theory of Brittle Fracture in Steel and Similar Metals*. Trans. of the Metall. Soc. of AIME, vol. 211, pp 192–203.
- [Curry, 1980] CURRY D.A. (1980). *Cleavage micromechanisms of crack extension in steels*. Met. Sci., vol. Aug-Sep, pp 319–326.
- [Curry et Knott, 1978] CURRY D.A. ET KNOTT J.F. (1978). *Effect of microstructure on Cleavage Fracture Stress in Mild Steel*. Met. Sci., vol. 12, pp 511–514.
- [Curry et Knott, 1979] CURRY D.A. ET KNOTT J.F. (1979). *Effect of microstructure on Cleavage Fracture Toughness in Mild Steel*. Met. Sci., vol. 13, pp 342–345.
- [Deshpande et al., 2003] DESHPANDE V.S., NEEDLEMAN A., ET DER GIESSEN E. VAN (2003). *Discrete dislocation plasticity modeling of short cracks in single crystals*. Acta Mater., vol. 51, pp 1–15.
- [Echeverria et Rodriguez-Ibabe, 2003] ECHEVERRIA A. ET RODRIGUEZ-IBABE J.M. (2003). *The role of grain size in brittle particle induced fracture of steels*. Acta Mater., vol. 51, pp 1841–1855.

- [Echeverria et Rodriguez-Ibabe, 2004] ECHEVERRIA A. ET RODRIGUEZ-IBABE J.M. (2004). *Cleavage micromechanisms on microalloyed steels. Evolution with temperature of some critical parameters*. Scripta Mater., vol. 50, pp 307–312.
- [Faleskog et al., 2004] FALESKOG J., KROON M., ET OBERG H. (2004). *A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale - parameter estimation and predictions of stationary crack experiments*. Eng. Frac. Mech., vol. 71, pp 57–79.
- [Français et al., 1993] FRANÇAIS D., PINEAU A., ET ZAOUÏ A. (1993). *Comportement mécanique des matériaux*. Editons Hermès.
- [Friedel, 1964] FRIEDEL J. (1964). *Dislocations*. Pergamon Press Editions.
- [Gourgues et al., 2000] GOURGUES A.F., FLOWER H.M., ET LINDLEY T.C (2000). *Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures*. Mater. Sci. Technol., vol. 16, pp 26–40.
- [Griffith, 1920] GRIFFITH A.A. (1920). *The phenomena of rupture and flow in solids*. Phil Trans. R. Soc. A, vol. 221, pp 163–198.
- [Guo et al., 2003] GUO Y.-F., WANG C.-Y., ET ZHAO D.L. (2003). *Atomistic simulation of crack cleavage and blunting in bcc-Fe*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 349, pp 29–35.
- [Hahn, 1984] HAHN G.T. (1984). *The influence of microstructure on brittle fracture toughness*. Metall. Trans. A, vol. 15, pp 947–959.
- [Hausild, 2002] HAUSILD P. (2002). *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Hausild et al., 2005] HAUSILD P., BERDIN C., ET BOMPARD P. (2005). *Prediction of cleavage fracture for a low-alloy steel in the ductile-to-brittle transition temperature range*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 391, pp 188–197.
- [Im et Lee, 2004] IM Y.-R. ET LEE B.-J. (2004). *Effect of microstructure on the cleavage fracture strength of low carbon Mn-Ni-Mo bainitic steels*. J. of Nucl. Mat., vol. 324, pp 33–40.
- [Kaechele et Tetelman, 1969] KAEICHELE L.E. ET TETELMAN A.S. (1969). *A statistical investigation of microcrack formation*. Acta Metall., vol. 17, pp 463–475.
- [Katz et al., 1993] KATZ Y., KELLER R.R., HUANG H., ET GERBERICH W.W. (1993). *A dislocation shielding model for the fracture of semibrittle polycrystals*. Metall. trans. A, vol. 24, pp 343–350.
- [Kim et al., 2003] KIM S., LEE S., YUMOTO H., ET SHIMOTOMAI M. (2003). *Effects of grain size on fracture toughness in transition temperature region of Mn-Mo-Ni low-alloy steels*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 359, pp 198–209.
- [Kroon et Faleskog, 2002] KROON M. ET FALESKOG J. (2002). *A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale-influence of material parameters and constraint*. Int. J. Frac., vol. 118, pp 99–118.
- [Kroon et Faleskog, 2005] KROON M. ET FALESKOG J. (2005). *Micromechanics of cleavage fracture initiation in ferritic steels by carbide cracking*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 53, pp 171–196.
- [Lambert-Perlade, 2001] LAMBERT-PERLADE A. (2001). *Rupture par clivage de microstructures d'aciers bainitiques obtenues en conditions de soudage*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.

- [Lee et al., 2002] LEE S., KIM S., HWANG B., LEE B.S., ET LEE C.G. (2002). *Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel*. Acta Mater., vol. 50, pp 4755–4762.
- [Lin et Evans, 1987] LIN T. ET EVANS A.G. (1987). *Stochastic modelling of the independent roles of particle size and grain size in transgranular cleavage fracture*. Metall. Trans. A, vol. 18, pp 641–651.
- [Lindley et al., 1970] LINDLEY T.C., OATES G., ET RICHARDS C.E. (1970). *A critical appraisal of carbide cracking mechanisms in ferrite/carbide aggregates*. Acta Metall., vol. 18, pp 1127–1136.
- [Ma, 1998] MA H. (1998). *The effect of stress triaxiality on the local cleavage stress in a granular bainitic weld metal*. Int. J. Frac., vol. 89, pp 143–157.
- [MacDougall, 1987] MACDOUGALL M.H. (1987). *Simulating Computer Systems*. M.I.T Press, Cambridge MA.
- [Machová et Beltz, 2004] MACHOVÁ A. ET BELTZ G.E. (2004). *Ductile-brittle behavior of (001)[110] nano-cracks in bcc iron*. Acta Mater., vol. 52, pp 4317–4328.
- [Margolin et al., 1998] MARGOLIN B.Z., GULENKO A.G., ET SHVETSOVA V.A. (1998). *Improved probabilistic model for fracture toughness prediction based for nuclear pressure vessel steels*. Int. J. of Press. Vessels and Piping, vol. 75, pp 843–855.
- [Margolin et al., 1999] MARGOLIN B.Z., SHVETSOVA V.A., ET GULENKO A.G. (1999). *Radiation embrittlement modelling for reactor pressure vessel steels : I. Brittle fracture toughness prediction*. Int. J. of Press. Vessels and Piping, vol. 76, pp 715–729.
- [Miannay, 1995] MIANNAY D. (1995). *Mécanique de la Rupture*. Les éditions de Physique.
- [Mudry, 1987] MUDRY F. (1987). *A local approach to cleavage fracture*. Nucl. Eng. and Design., vol. 105, pp 65–76.
- [Nohava et al., 2003] NOHAVA J., HAUSILD P., KARLIK M., ET BOMPARD P. (2003). *Electron backscattering diffraction analysis of secondary cleavage cracks in a reactor pressure vessel steel*. Mat. Charact., vol. 49, pp 211–217.
- [Odette et al., 2003] ODETTE G.R., YAMAMOTO T., RATHBURN H.J, HE M.Y., HRIBERNIK M.L., ET RENSMAN J.W. (2003). *Cleavage fracture and irradiation embrittlement of fusion reactor alloys : mechanisms, multiscale models, toughness measurements and implications to structural integrity assessment*. J. of Nucl. Mat., vol. 323, pp 313–340.
- [Ortner, 2002] ORTNER S. (2002). *Factor affecting the shape of the ductile-to-brittle transition*. Int. J. of Press. Vessels and Piping, vol. 79, pp 693–700.
- [Ortner et al., 2005] ORTNER S.R., DUFF J., ET BEARDSMORE D.W. (2005). *Characterisation of Euro A Reference steel for application of EOH model of brittle fracture - Technical report SA/EIG/15234/R003 - Project PERFECT*. SERCO Assurance.
- [Ortner et Hippsley, 1996] ORTNER S.R. ET HIPPSLEY C.A. (1996). *Two component description of ductile to brittle transition in ferritic steel*. Mater. Sci. Technol., vol. 12, pp 1035–1042.
- [Parrot, 2002] PARROT A. (2002). *Etude bibliographique des domaines de validité des modèles d'approche locale dans le domaine de la transition vis çavis des mécanismes de rupture de l'acier de cuve*. Note interne EDF R&D. HT-26/02/050/A.

- [Pesci, 2004] PESCI R. (2004). *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Qiao et Argon, 2003a] QIAO Y. ET ARGON A.S. (2003a). *Cleavage crack-growth-resistance of grain boundaries in polycrystalline Fe-2%Si alloy : experiments and modeling*. Mech. Mater., vol. 35, pp 129–154.
- [Qiao et Argon, 2003b] QIAO Y. ET ARGON A.S. (2003b). *Cleavage cracking resistance of high angle grain boundaries in Fe-3% Si alloy*. Mech. Mater., vol. 35, pp 313–331.
- [Reed-Hill, 1973] REED-HILL R.E. (1973). *Physical Metallurgy Principles*. D. Van Nostrand Company.
- [Renevey, 1998] RENEVEY S. (1998). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay - CEA.
- [Rice et Tracey, 1973] RICE J.R. ET TRACEY D.M. (1973). *Numerical Computer Methods in Structural Mechanics*. chapitre : Computational Fracture Mechanics, pp 585–623. Academic Press, New-York.
- [Ritchie et al., 1973] RITCHIE R.O, KNOTT J.F, ET RICE J.R. (1973). *On the relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel*. J. Mech. Phys. Solids, vol. 21, pp 395–410.
- [Roos et al., 2005] ROOS E., STUMPFROCK L., SCHULER X., ET EISELE U. (2005). *Fracture mechanics safety analysis of component based on fracture characteristics combined with multiaxiality of the stress state*. Int. J. of Press. Vessels and Piping, vol. 82, pp 355–362.
- [Rossol, 1998] ROSSOL A. (1998). *Détermination de la ténacité d'un acier faiblement allié çapartir de l'essai Charpy instrumenté*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Paris.
- [Schoeck, 2003] SCHOECK G. (2003). *The emission of dislocations from crack tips - A critical assessment*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 356, pp 93–101.
- [Smith, 1966] SMITH E. (1966). *The nucleation and growth of cleavage microcracks in mild-steels*. Proceedings Conference on 'Physical basis of yield and fracture', pp 36–46. Institute of Physics and Physical Society, Oxford London.
- [Stroh, 1954] STROH A.N. (1954). *The formation of cracks as a result of plastic flow*. Proc. Roy. Soc. London A, vol. 223, pp 404–414.
- [Tanguy, 2001] TANGUY B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Tanguy et al., 2003] TANGUY B., BESSON J., ET PINEAU A. (2003). *Comment on Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel*. Scripta Mater., vol. 49, pp 191–197.
- [Tanguy et al., 2005] TANGUY B., BESSON J., PIQUES R., ET PINEAU A. (2005). *Ductile to brittle transition of an A508 steel characterized by Charpy impact test - Part I : experimental results*. Eng. Frac. Mech., vol. 72, pp 49–72.
- [Thompson et Knott, 1993] THOMPSON A.W. ET KNOTT J.F. (1993). *Micromechanisms of Brittle Fracture*. Metall. trans. A, vol. 24, pp 523–534.

- [Wallin, 1984] WALLIN K. (1984). *The scatter in K-results*. Eng. Frac. Mech., vol. 19, pp 1085–1093.
- [Wallin et al., 1984] WALLIN K., SAARIO T., ET TORRONEN K. (1984). *Statistical model for carbide induced brittle fracture in steels*. Met. Sci., vol. 18, pp 13–16.
- [Weibull, 1951] WEIBULL W. (1951). *A statistical distribution function of wide applicability*. J. App. Mech., Trans. ASME, vol. 18, pp 293–297.
- [Yahya, 1997] YAHYA O.M.L (1997). *Approche locale de la rupture fragile intergranulaire de l'acier 16MND5*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Yang et al., 2003] YANG W.J, LEE B.S., HUH M.Y., ET HONG J.H. (2003). *Application of the local fracture stress model on the cleavage fracture of the reactor pressure vessel steels in the transition temperature region*. J. of Nucl. Mat., vol. 317, pp 234–242.
- [Yang et al., 2004] YANG W.-J., LEE B.-S., WANG G.Z., ET LIU Y.G. (2004). *Microstructural parameters governing cleavage fracture behaviors in the ductile-brittle transition in reactor pressure vessel steels*. Mat. Sci. and Eng. A, vol. 379, pp 17–26.
- [Zener, 1948] ZENER C. (1948). *Fracturing of Metals*. 29 th National Metal Congress and Exposition, pp 3–31. American Society for Metals.
- [Zhang et Knott, 1999] ZHANG X.Z. ET KNOTT J.F. (1999). *Cleavage fracture in bainitic and martensitic microstructures*. Acta Mater., vol. 47, pp 3483–3495.

Chapitre -VI-

Conclusion et perspectives

Sommaire

VI.1	Synthèse	228
VI.2	Perspectives	230
VI.2.1	Caractérisation expérimentale	230
VI.2.2	Modélisation du comportement	230
VI.2.3	Modélisation de la rupture	231

VI.1 Synthèse

- Le chapitre II montre que les hétérogénéités de microstructures se situent à l'échelle du paquet de lattes ferritiques. Celles-ci sont de deux natures différentes : on distingue ainsi l'aspect "polycristal" qui est la conséquence des orientations locales du réseau cristallin et l'aspect "composite" qui traduit la présence de cémentite au sein de la microstructure. Une caractérisation morphologique de ces aspects est effectuée en lien avec une synthèse bibliographique.

On décrit ainsi les principales dimensions caractéristiques des entités microstructurales, ce qui permet d'aboutir à une représentation synthétique de la microstructure.

- Le chapitre III présente les principaux résultats expérimentaux. Il permet de lier les hétérogénéités mécaniques mises en évidence avec les observations faites au chapitre précédent.

Les observations in-situ au MEB en cours de traction à basse température mènent à l'observation qualitative des effets des hétérogénéités de microstructure (joints de grains, désorientations, présence de carbures).

Des essais de traction à basses températures in-situ couplés aux analyses par diffraction des rayons X permettent d'obtenir la distribution des contraintes par phases du matériau. Lors d'un essai traction, on met en évidence par la méthode des $\sin^2\psi$ une différence de contrainte pouvant atteindre 150 MPa entre la bainite et la phase ferritique. Par ailleurs, l'utilisation de la méthode met en évidence de fortes oscillations des courbes $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$, caractéristiques de la déformation à froid du matériau.

L'utilisation de la méthode des blocs de cristaux montre enfin une forte hétérogénéité des contraintes au sein même de la phase ferritique (jusqu'à 100 MPa entre les différentes orientations) confirmant la représentativité des oscillations $\sin^2\psi$.

- Le début du chapitre IV est tout d'abord l'occasion d'une revue bibliographique des outils de modélisation disponibles pour prendre en compte les hétérogénéités mécaniques évoquées au chapitre III.

On y fait ensuite, dans la seconde partie, plusieurs choix de représentation qui aboutissent à une démarche multi-échelles de modélisation. Le comportement de la phase ferritique est décrit par une loi monocristalline élasto-viscoplastique prenant le glissement sur les systèmes cristallographiques comme variable interne. Cette loi est ensuite associée grâce à un modèle à champs moyens au comportement supposé élastique des amas de carbures. Ce modèle en champs moyens est calibré sur une représentation de la microstructure en amas par éléments finis, puis introduit dans un calcul d'agrégat multicristallin 3D au niveau de chaque point d'intégration. Une procédure itérative d'optimisation est ensuite détaillée afin de caler le comportement de l'agrégat à différentes basses températures. Seuls trois paramètres correspondant

au comportement de la ferrite sont ajustés. Tous les autres sont issus de la littérature ou découlent des choix de modélisation.

Le comportement est bien reproduit, aussi bien en termes macroscopique, qu'à l'échelle micromécanique : les résultats sont cohérents entre les différentes échelles et l'on parvient dans la troisième partie à simuler les oscillations des courbes $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\psi)$ obtenues expérimentalement.

- La première partie du chapitre V fait l'état de l'art des modèles d'approche locale utilisés pour représenter la rupture fragile par clivage des aciers faiblement alliés. En présentant tout d'abord les aspects de modélisation, pour introduire les questions toujours en suspens au niveau des micromécanismes de rupture locaux, on met en évidence un manque flagrant dans l'approche locale : celle-ci ne peut à l'heure actuelle s'appuyer sur un outil qui ferait le lien entre les micromécanismes supposés et l'expression de la probabilité de rupture d'un volume élémentaire. On note toutefois un consensus sur l'événement déclencheur de la rupture par clivage à basse température : l'endommagement local sur les carbures ou sur les particules de seconde phase est mis en cause dans la majorité des travaux sur la rupture fragile des aciers de cuve.

On présente donc dans la deuxième partie du manuscrit une démarche visant à utiliser la richesse des informations obtenues par la modélisation multi-échelle du chapitre III, et notamment la possibilité d'utiliser un critère local de rupture par clivage. En émettant des hypothèses relativement cohérentes avec les hypothèses habituellement faites pour l'approche locale, on met en place un post-traitement permettant de simuler la rupture d'un volume élémentaire pour différentes distributions de tailles carbures. On obtient donc un traitement déterministe d'un même calcul mécanique permettant de dériver une probabilité de rupture pour le volume élémentaire.

Sans qu'il soit besoin de supposer une quelconque forme statistique pour cette probabilité de rupture, les premières applications démontrent une cohérence remarquable entre les résultats de cette approche micromécanique et les formes statistiques de probabilité de rupture postulées dans l'approche locale.

L'avantage est ici que l'on peut agir simplement sur les différents paramètres de chargement (triaxialité, température) et de microstructure (taille de carbures, énergie équivalente de surface) afin de mettre en évidence de manière naturelle leur influence sur la probabilité de rupture.

Toute la fin de ce chapitre est consacrée à l'application de la méthodologie afin de mettre en évidence les paramètres influents sur la rupture fragile. L'effet de la température est principalement traduit comme une dépendance à l'énergie de surface équivalente. L'introduction de cette dépendance permet de reproduire l'effet de la température identifié expérimentalement dans d'autres travaux.

Par ailleurs, l'effet de la nature triaxiée du chargement est mis en évidence. Sa prise en compte paraît incontournable puisque son influence est importante sur la rupture d'un volume élémentaire.

VI.2 Perspectives

VI.2.1 Caractérisation expérimentale

Le besoin de nouvelles données expérimentales a été largement mis en évidence dans ces travaux.

Au niveau de la caractérisation de la microstructure, la détermination de la fraction volumique de carbures, ainsi qu'une caractérisation morphologique poussée pourraient permettre d'améliorer la représentation de la microstructure, et de ne plus avoir à utiliser la fraction volumique d'amas comme un paramètre. D'autre part, une étude de la répartition des tailles de carbure associée à une démarche statistique permettant de bien rendre compte de la queue de distribution des tailles devrait permettre d'atténuer l'effet de la représentation non-satisfaisante de la distribution sur la modélisation des phénomènes de rupture fragile.

Les mesures de DRX en cours de charge sont à améliorer, ne serait-ce qu'au niveau des problèmes techniques rencontrés. L'utilisation et l'adaptation d'appareils de mesure portatifs rapides tel l'appareil PROTO de l'ENSAM de Metz pourraient permettre de simplifier les campagnes in-situ à basses températures.

D'autre part, l'utilisation de la diffraction aux grands instruments pourrait permettre d'étudier les niveaux de contrainte de la cémentite, qui sont pour l'instant peu connus. Par ailleurs, le développement de techniques permettant l'accès aux hétérogénéités intra-granulaires (micro-diffraction Kossel) semble être une voie prometteuse.

La capacité à effectuer des mesures dans la masse pourrait, avec des géométries entaillées adaptées, donner accès aux hétérogénéités de contrainte dans la ferrite et entre les phases pour des chargements triaxiés.

Enfin, pour ce qui est de la rupture, on pourrait envisager une vaste campagne de mesure sur éprouvettes de mécanique de la rupture visant à confirmer ou infirmer les influences supposées de la température et de la triaxialité mises en évidence par ces travaux, bien que l'on rappelle qu'ils sont dépendants l'un de l'autre, la température influant sur le comportement.

Une autre donnée expérimentale serait très intéressante, si elle était facilement accessible : la valeur et la dépendance de l'énergie de surface équivalente γ_p en température améliorerait elle aussi le caractère prédictif de la démarche.

VI.2.2 Modélisation du comportement

Une des premières pistes d'amélioration consisterait à tenter l'utilisation d'éléments permettant de s'affranchir de la mauvaise description de la pression. L'amélioration

probable de la description des champs mécaniques ne pourrait alors que profiter à la démarche. On sait que l'on augmenterait le nombre de degrés de liberté du problème ce faisant, mais l'élimination des fortes perturbations des champs intra-élément pourrait permettre d'accélérer fortement les résolutions locales d'équations aux dérivées partielles, et au final améliorer aussi les temps de calcul nécessaires actuellement.

L'étude de la transition, qui passe par une description du comportement pour de fortes déformations pourrait être améliorée par l'utilisation de modélisations formulées en grandes transformations.

En ce qui concerne le comportement micromécanique, l'utilisation d'une formulation prenant en compte les effets de température et faisant intervenir différents mécanismes de déformation telle que celle utilisée au CEA pourrait aussi améliorer la représentation des hétérogénéités, qui auraient une influence sur la dépendance en température.

On a mis en évidence une augmentation très importante en contrainte des amas. On pourrait essayer de leur attribuer un comportement élasto-viscoplastique avec une forte limite d'élasticité et un fort écrouissage afin d'éviter une charge trop importante en contrainte.

Par ailleurs, la représentation de la morphologie en paquets de lattes mérite d'être améliorée afin de prendre en compte au mieux la microstructure. La piste de la reconstruction de microstructures s'appuyant sur l'ancien grain austénitique paraît prometteuse. La prise en compte de l'effet des carbures par une introduction explicite dans les maillages a déjà été évoquée, bien que son emploi nécessite un coût numérique assez important pour s'approcher d'un volume représentatif.

La notion de VER n'a d'ailleurs pas été validée ici. La dépendance manifeste aux CAL pourrait pousser à étudier l'influence du volume considéré. De la même façon, on pourrait étudier la représentativité de l'agrégat en utilisant un autre maillage pour le post-traitement afin de vérifier que l'on est pas trop dépendant d'une seule microstructure.

VI.2.3 Modélisation de la rupture

On a déjà évoqué les problèmes posés par la mauvaise description des répartitions de tailles de carbures, et par la méconnaissance de l'énergie de surface. Pour cette dernière, si l'obtention de valeurs expérimentales autres que celles obtenues par une approche inverse est difficile, on peut espérer obtenir un jour des informations provenant des échelles inférieures de modélisation. Bien qu'il reste un énorme chemin à parcourir, l'obtention de valeurs extraites des simulations de dynamique des dislocations pourrait offrir une solution commode aux problèmes rencontrés.

De la même façon, ce type de modélisation pourra permettre de prendre en compte les effets de l'irradiation sur le matériau, afin d'appliquer la démarche sur le comportement irradié, et d'étudier l'influence de l'irradiation sur la dispersion de rupture.

Au niveau de la démarche elle-même, il pourrait être intéressant d'étudier l'influence croisée des paramètres de température et de triaxialité, les évolutions envisagées ici en

température et en triaxialité étant toujours découplées. Cela nécessite toutefois, comme déjà évoqué, un nouvel effort afin de diminuer les temps de simulations, qui nécessitent des moyens de calculs conséquents.

Pour étudier les effets couplés des différents paramètres de manière plus pragmatique, il est possible d'utiliser les calculs sur agrégats d'une autre manière : une fois un certain nombre de simulations effectuées on pourrait s'appuyer sur une description statistique des répartitions des contraintes critiques sur les plans de clivage en fonction de la température et du chargement mécanique (triaxialité) à rapprocher de la description statistique des tailles de défauts, d'autant plus que la présente étude permet de minimiser l'influence de la germination dans le cas de l'acier de cuve.

Enfin le développement d'une nouvelle formulation dérivée de celle de Beremin et des présents travaux, prenant en compte les effets de température et de chargement, associée à une modélisation du comportement avec endommagement mériterait d'être développée. Couplée à une identification sur des chargements bien choisis, elle permettrait de confirmer sa bonne capacité à prendre en compte les mécanismes mis en jeu dans la transition fragile-ductile.

Annexe -A-I-

Courbes de comportement à basses températures

La figure A-I.1.a présente les courbes de traction déterminées lors d'essais à basses températures, utilisés pour la caractérisation des hétérogénéités mécaniques par les méthodes de diffraction des rayons X au chapitre III. Les résultats des présents travaux, lorsqu'on les compare à ceux de Renevey [Renevey, 1998] obtenus sur le même matériau, en sont très proches. La vitesse de sollicitation est quasi-statique pour les deux séries d'essais ($10^{-4} s^{-1}$). Pour les basses températures, on interprète le palier de limite d'élasticité sur les courbes de traction comme dû à la localisation de la déformation dans les bandes de Piobert-Lüders. On observe une diminution classique de la limite d'élasticité avec la température. Elle passe d'environ 750 MPa pour $-160^{\circ}C$ à 500 MPa pour $-60^{\circ}C$

Ces courbes n'étant pas disponibles au moment de l'ajustement des lois de comportement, les résultats de Renevey ont été utilisés pour alimenter les simulations.

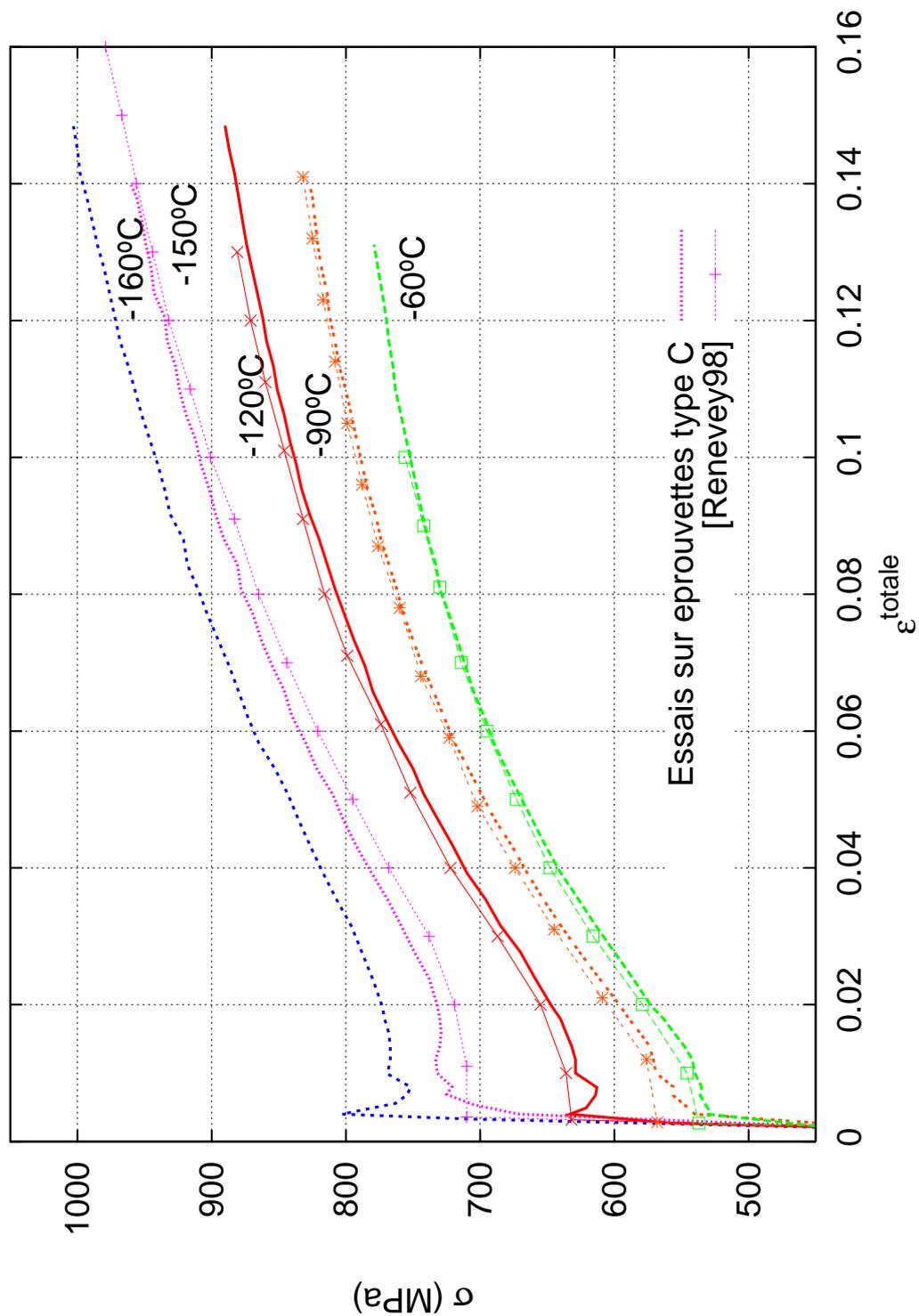


FIG. A-I.1 – Essais de traction uniaxiale (sens T) à différentes températures sur le matériau BQ12. Comparaison des résultats obtenus dans ces travaux avec les courbes idéalisées ayant servi à l’ajustement des lois de comportement [Renevey, 1998]. Les perturbations présentes en début de plasticité, dues aux instabilités de déformation, ont été éliminées dans les résultats de Renevey. La géométrie des éprouvettes C est décrite au paragraphe III.1.1.b).

Annexe -A-II-

Méthodes expérimentales mises en oeuvre

Sommaire

A-II.1	Microscopie électronique et EBSD	235
A-II.1.1	EBSD (Electron Back-Scattered Diffraction)	236
A-II.1.2	Images MEB-FEG	237
A-II.2	La diffraction des Rayons X	237
A-II.2.1	Principes de base	237
A-II.2.2	Méthode des $\sin^2\psi$: détermination de la contrainte macroscopique dans une direction	243
A-II.2.3	Méthode des Blocs De Cristaux (BDC), détermination des contraintes par orientation cristallographique	243
A-II.3	Difficultés expérimentales liées à la machine de traction <i>in-situ</i> - étalonnage	244

A-II.1 Microscopie électronique et EBSD

L'utilisation de la microscopie électronique est généralisée depuis de nombreuses années au sein des laboratoires. On notera toutefois que diverses améliorations peuvent être apportées à la technique afin de la rendre plus performante. L'apparition des MEB pourvus de canons FEG (Field Emission Gun - à effet de champ) a permis d'accroître les résolutions accessibles. Outre les capacités en imagerie offertes par ces appareillages, il est possible de leur associer divers accessoires et détecteurs qui enrichissent leurs possibilités.

A-II.1.1 EBSD (Electron Back-Scattered Diffraction)

L'EBSD, ou diffraction des électrons rétro-diffusés, est une technique qui s'est fortement développée il y a une dizaine d'années, et qui permet de déterminer l'orientation cristallographique d'une zone excitée par un faisceau d'électrons incident (comme celui d'un MEB par exemple) [Randle et al., 1988]. Il résulte de cette excitation l'émission par chaque plan atomique de la maille d'une paire de cônes de diffraction de forts angles, qui, interceptés par un écran phosphorescent, forment une bande de Kikuchi (figure A-II.1.a). Chaque plan de la maille est ainsi à l'origine d'une bande de Kikuchi et l'ensemble forme un diagramme de Kikuchi, comme montré en exemple sur la figure A-II.1.b.

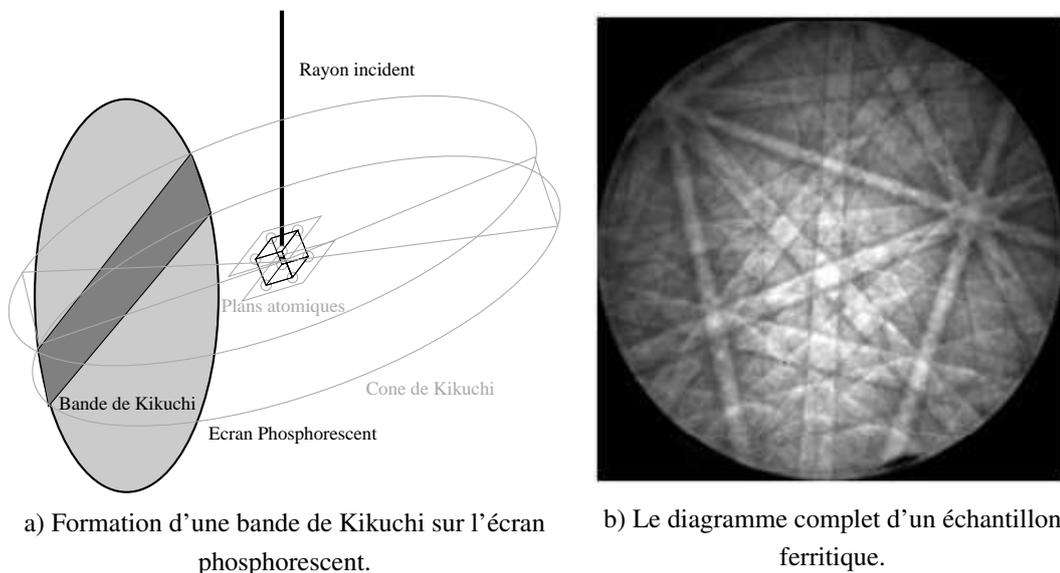


FIG. A-II.1 – Diagrammes de Kikuchi.

Il reste à indexer le diagramme obtenu, c'est-à-dire à associer à chaque bande le plan cristallographique associé. Cela passe par l'enregistrement du diagramme par une caméra, puis par l'indexation des bandes effectuée en temps réel par le logiciel fourni avec l'équipement, et basée sur une transformation mathématique de l'image numérique du diagramme. Cette indexation est enfin rapprochée d'un diagramme théorique, ce qui conduit à l'obtention de trois angles d'Euler qui caractérisent l'orientation de la zone observée.

La zone diffractante est très fine (environ 20 nm d'épaisseur). La résolution spatiale de la technique dépend alors du type de microscope utilisé (i.e. de la finesse de faisceau accessible). Pour un MEB standard, la résolution est de l'ordre du μm , alors qu'elle peut être de 100 à 50 nm sur un MEB-FEG récent. La plupart des travaux de caractérisation EBSD des présents travaux ont été effectuée sur un MEB standard.

A-II.1.2 Images MEB-FEG

Les images obtenues au FEG du centre de recherche EDF des Renardières ont été reconstituées à l'aide de deux images. La première est obtenue par un détecteur "in-lens" qui permet d'obtenir des images très précises qui mettent en évidence de façon très nette les carbures. Cette image est moyennée avec celle obtenue par un détecteur d'électrons secondaires. De par son placement incliné par rapport au faisceau dans la chambre du MEB, celui-ci offre une image moins bien résolue mais plus contrastée du relief de surface. Un exemple d'image reconstituée est présenté en figure A-II.2.

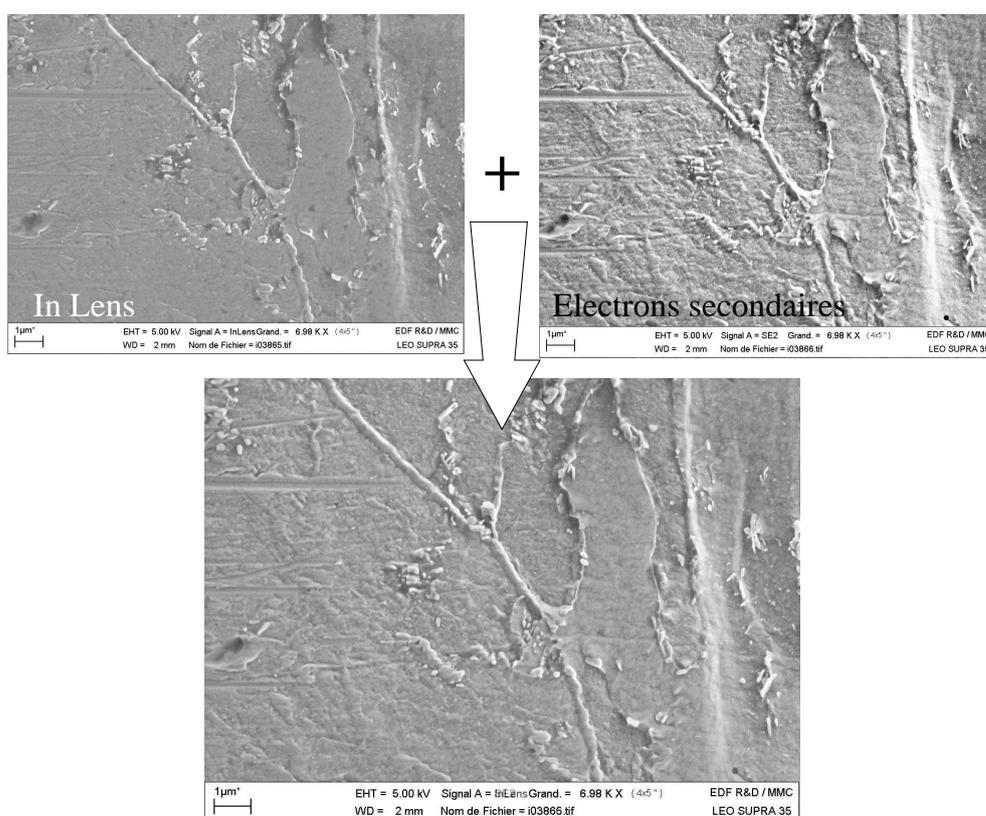


FIG. A-II.2 – Le processus d'obtention des images à l'aide du MEB-FEG.

A-II.2 La diffraction des Rayons X

A-II.2.1 Principes de base

a) Le rayonnement X

Les rayons X sont une forme de rayonnement découverte par hasard par Wilhelm Röntgen en 1895, alors qu'il travaillait, comme beaucoup de physiciens à l'époque, sur une

ébauche de tube cathodique. C'est en 1912 que Von Laue détermine leur vraie nature, soit un rayonnement électromagnétique semblable à la lumière, mais de longueur d'onde beaucoup plus petite (et donc d'une énergie bien plus grande). C'est le faible ordre de grandeur de ces longueurs d'onde, de l'ordre de celle des distances interatomiques des cristaux qui leur confère la propriété de diffracter dans les réseaux atomiques de ces mêmes cristaux. Une fois la loi établissant la longueur d'onde du rayonnement en fonction des conditions d'émission connue, les travaux de W.H. Bragg et de W.L. Bragg (son fils) ont permis d'établir la loi de Bragg, qui régit la diffraction des radiations sur un cristal [Ravy, 2005]. Cette loi est l'oeuvre du fils, alors que le père travaillait sur le développement du spectromètre de rayons X.

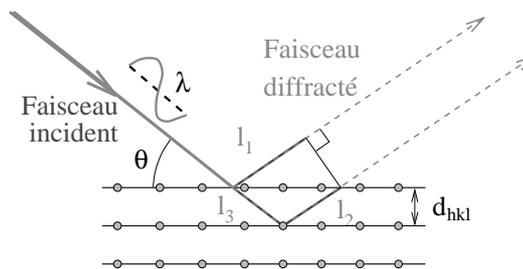


FIG. A-II.3 – Illustration du principe de la loi de Bragg.

On considère une famille de plans cristallins de distance inter-réticulaire d_{hkl} , et un rayonnement de longueur d'onde λ , θ étant l'angle entre les plans diffractants et le rayonnement incident. Aux plans cristallins considérés sont associés des plans imaginaires considérés comme semi-transparents aux rayons X (figure A-II.3). Sachant que l'interférence constructive (diffraction) entre ondes ne peut se faire que si elles sont en phase (i.e. si la différence de longueur parcourue est un multiple entier de la longueur d'onde). On obtient la condition de diffraction suivante :

$$l_2 + l_3 - l_1 = n \cdot \lambda \quad (\text{A-2.1})$$

Il vient pour la formule de Bragg :

$$2 \cdot d_{hkl} \sin \theta = n \cdot \lambda \quad (\text{A-2.2})$$

Il convient de préciser que l'illustration donnée à la figure A-II.3 n'est qu'une vue de l'esprit. L'émission de rayons X n'est généralement pas cohérente, et les ondes sont en fait diffusées individuellement par chaque atome. Les explications des mécanismes d'excitation des atomes, qui touchent à la physique des particules, ont conduit à la validation de cette théorie, qui cache une réalité plus complexe [Ravy, 2005].

b) Diffraction pour l'acier 16MND5

La première étape de l'étude d'un matériau cristallin est l'obtention d'un diffractogramme, où sont représentés l'ensemble de ses pics de diffraction pour un rayonnement incident de longueur d'onde donnée. La figure A-II.4 montre par exemple le diffractogramme de l'acier 16MND5 pour une anticathode de cobalt.

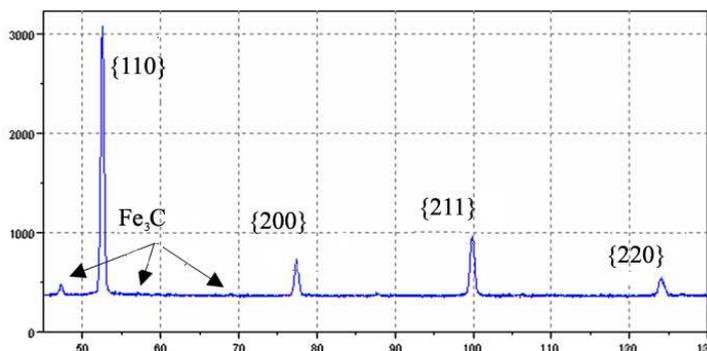


FIG. A-II.4 – Diffractogramme obtenu pour l'acier 16MND5 en utilisant une anticathode de cobalt [Pesci, 2004].

On observe les pics de la ferrite, ainsi que de faibles pics diffractés par la cémentite. Chaque pic représente la diffraction d'une famille de plans, dont on peut déterminer la distance inter-réticulaire grâce à la loi de Bragg, en utilisant la position en 2θ du centre du pic. Pour la suite des travaux, un seul pic du diffractogramme est utilisé. Il est choisi assez intense et si possible d'un angle 2θ le plus élevé possible pour garantir de bons résultats de détermination de contrainte. La mesure élémentaire consiste alors à déterminer la position angulaire précise du centre du pic de diffraction.

Les moyens à mettre en oeuvre pour détecter ce pic (qui s'étend sur une plage angulaire donnée) varient en fonction du type de détecteur de diffraction utilisé. Dans le cas d'un détecteur ponctuel, il est nécessaire que le détecteur balaie la plage angulaire 2θ où se situe le pic pour pouvoir le détecter, alors qu'en utilisant un détecteur linéaire (i.e. une multitude de détecteurs ponctuels), on acquiert plus facilement le pic avec un nombre raisonnable de mesures. A titre de comparaison, une analyse de contrainte sur la matrice ferritique de l'acier 16MND5 par la méthode des $\sin^2\psi$ qui nécessite la détermination d'une quinzaine de pics (voir chapitre suivant), prendra un temps de l'ordre de plusieurs heures avec un détecteur ponctuel, alors qu'elle durera quelques dizaines de minutes avec un détecteur linéaire.

Les essais de diffraction envisagés ici concernent principalement la ferrite. La cémentite peut servir de base à une étude par diffraction des rayons X. Toutefois elle nécessite un rayonnement plus puissant, tel un rayonnement synchrotron pour être étudiée dans de bonnes conditions à de si faibles fractions volumiques [Tomota et al., 2003, Oliver et al., 2004, Belassel, 1994].

Dans notre cas, la plupart des expériences utilise la détermination du pic associé à la famille de plans $\{112\}$ de la ferrite, étudié grâce au rayonnement $K\alpha$ d'une anticathode de chrome. La position usuelle de ce pic se situe à $2\theta=156,1^\circ$.

c) Cas d'un matériau polycristallin - repérage de l'échantillon

Dans le cas de l'acier 16MND5, la taille de grains relativement réduite par rapport au volume analysé (généralement une surface de 10 mm^2 pour une profondeur de l'ordre d'une dizaine de microns) fait que différents grains diffractent pour différentes positions du faisceau incident (figures A-II.5.a et A-II.5.b).

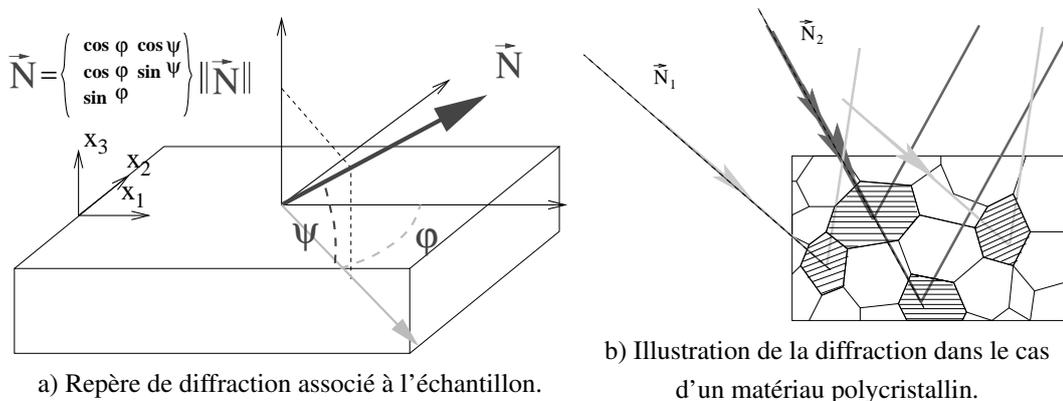


FIG. A-II.5 – La diffraction d'un matériau polycristallin.

Lors d'une expérimentation, on fait en sorte que l'angle 2θ (associé au pic recherché) reste constant. On ajoute donc au couple canon X-détecteur un goniomètre qui permet de tourner l'échantillon autour des axes ψ et ϕ présentés à la figure A-II.5.a. Par extension on utilise couramment le terme de goniomètre pour qualifier l'ensemble de l'appareillage. Il est important pour la suite de bien différencier les angles ϕ et ψ , qui caractérisent la direction de mesure par rapport à l'échantillon de l'angle θ qui caractérise l'angle de diffraction, et donc le pic de diffraction utilisé, et qui ne change pas en cours d'essai (sauf cas où l'on étudie deux phases cristallines différentes).

La figure A-II.5.b montre bien que pour une même zone étudiée, le volume diffractant V_d dépend de l'orientation du faisceau incident par rapport à l'échantillon, et donc des angles ϕ et ψ .

d) Effet d'une contrainte sur la mesure de diffraction

Jusqu'ici, l'effet sur la mesure de diffraction d'une contrainte sur le matériau n'a pas été évoqué. Généralement, il résulte d'un état de contrainte quelconque une déformation. La partie élastique de cette déformation (distorsion du réseau cristallin) est considérée comme linéairement proportionnelle à cette contrainte suivant la loi de Hooke. La distance interréticulaire est donc affectée par un état de contrainte, modifiant ainsi légèrement l'angle

de diffraction de Bragg associé. On note d la distance interréticulaire du matériau contraint, et d_0 la distance interréticulaire du matériau non contraint. La figure A-II.6 illustre l'effet d'une contrainte sur le matériau et sur la détermination de la position du pic.

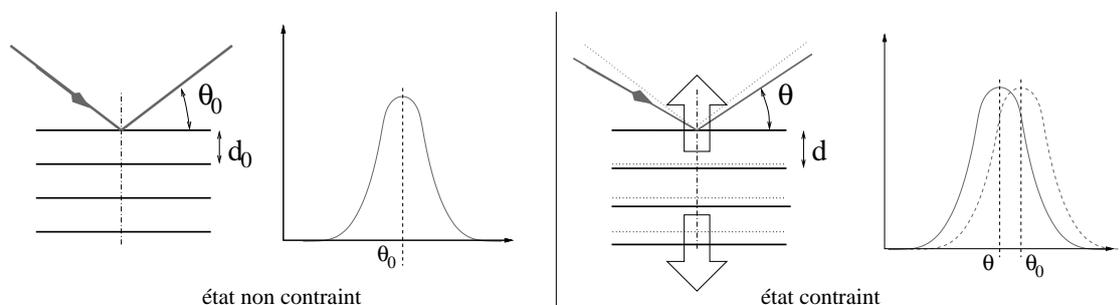


FIG. A-II.6 – Effet de la contrainte sur la position du pic de diffraction.

Notons aussi que la déformation plastique macroscopique peut avoir des effets indirects sur le pic de diffraction (élargissement de pics). La multiplication des structures de dislocations et la présence d'incompatibilités plastiques (aux joints de grains ou entre les phases) peuvent avoir un effet en ce sens qu'elles sont équilibrées ou compensées par des déformations élastiques.

Il est aisé de déduire la déformation élastique associée au changement du paramètre de réseau comme étant :

$$\varepsilon^e = \frac{d - d_0}{d_0} \quad (\text{A-2.3})$$

Dans le cas d'une telle mesure pour un matériau polycristallin, la déviation de la position du pic dépend non seulement de l'état de contrainte macroscopique, mais aussi de la direction de mesure, qui détermine les plans diffractants selon leur orientation. Or l'effet de la contrainte macroscopique sur la déformation élastique d'une famille de plans dépend lui aussi de l'orientation de ces plans (figure A-II.7).

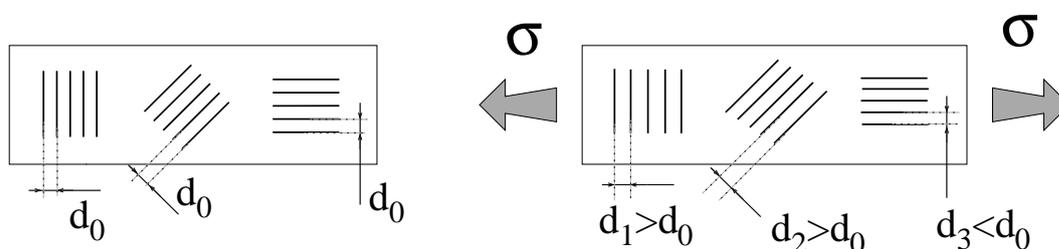


FIG. A-II.7 – Effet de l'orientation des plans sur leur déformation.

Chaque détermination de position de pic pour une direction donnée ($\phi; \psi$) permet de déterminer la déformation élastique associée $\varepsilon_{\phi\psi}$ comme étant :

$$\varepsilon_{\phi\psi} = \frac{d_{\phi\psi} - d_0}{d_0} = \frac{\sin \theta_0}{\sin \theta_{\phi\psi}} - 1 \approx -[\cotan(\theta_0)] \cdot (\theta_{\phi\psi} - \theta_0) \quad (\text{A-2.4})$$

Cette déformation est donc une déformation représentative sur le volume diffractant. On ne saurait toutefois la considérer comme une moyenne sur le volume diffractant, puisque le matériau absorbe les rayons X de manière exponentielle en fonction de la profondeur de pénétration.

e) Détermination de l'état non contraint

La détermination de la position du pic de diffraction pour le matériau non contraint (θ_0) s'avère difficile, puisque les échantillons à analyser sont rarement exempts de contraintes résiduelles. Trois solutions peuvent être envisagées :

- Utiliser la position du pic pour $\psi = 0$ comme référence. Cette méthode conduit à une marge d'erreur inférieure à 3% avec la méthode des $\sin^2\psi$ dans le cas où la trace du tenseur des contraintes est de l'ordre de 1000 MPa [Lu, 1996].
- Utiliser la diffraction sur une fine poudre du matériau utilisé, alors considéré comme libre de contrainte. Cette méthode nécessite de disposer de la dite poudre.
- Utiliser les données pour un matériau connu et proche. Dans le cas du 16MND5, l'utilisation des données d'une poudre de fer pur (alors sous sa phase ferritique) est envisageable. Toutefois, la présence d'éléments d'addition (interstitiels) peut avoir une influence sur le paramètre de maille de la ferrite du 16MND5 et il est difficile de quantifier l'erreur sur les mesures.

Afin de déterminer le paramètre de maille sur le matériau (16MND5 BQ12), un échantillon a été soumis à un polissage électrolytique sur une forte profondeur pour éliminer toute contrainte résiduelle. Après vérification de l'obtention d'un état de contrainte nul dans l'échantillon par la méthode des $\sin^2\psi$, le pic {220} pour une anticathode de fer a été recherché pour différents angles d'incidence ψ .

$\psi(^{\circ})$	$2\theta(^{\circ})$	$d_{220}(\text{Å})$	$a(\text{Å})$
0	145,3383	1,014057	2,86818
30	145,3315	1,014076	2,86824
60	145,3384	1,014574	2,86818

TAB. A-II.1 – Détermination du paramètre de maille du matériau non contraint sur les plans {220} de la ferrite pour une anticathode de fer à température ambiante.

La valeur $a_0 = 2,8682$ a été retenue comme paramètre de maille pour le matériau non contraint. Par ailleurs le même type de détermination a été menée pour le même échantillon en utilisant une anticathode de chrome, qui sert aussi pour les méthodes de détermination des contraintes. Le résultat obtenu est tout à fait cohérent avec la mesure précédente, et nous permet de déterminer un paramètre de maille $a_0 = 2,8682\text{Å}$.

A-II.2.2 Méthode des $\sin^2\psi$: détermination de la contrainte macroscopique dans une direction

a) Principe

La distance interréticulaire des familles de plans atomiques peut donc être utilisée comme une jauge de déformation. Il est possible de réécrire l'équation de Hooke généralisée dans le repère de mesure de la diffraction afin de l'appliquer à la détermination des contraintes par diffraction des rayons X [Hauk, 1997]. Ainsi pour un matériau macro-homogène, et isotrope, on peut mettre en relation $\varepsilon_{\phi\psi}$ et l'état de contrainte pseudo-macroscopique dans le matériau :

$$\varepsilon_{\phi\psi} = \frac{1}{2}S_2(\sigma_{\phi} - \sigma_{33}) \cdot \sin^2\psi + S_1 \cdot \text{tr}(\sigma) + \frac{1}{2}S_2 \cdot \tau_{\phi} \cdot \sin 2\psi + \frac{1}{2}S_2 \cdot \sigma_{33}$$

avec
$$\begin{cases} \sigma_{\phi} = \sigma_{11} \cdot \cos^2 \phi + \sigma_{12} \cdot \sin 2\phi + \sigma_{22} \cdot \sin^2 \phi \\ \tau_{\phi} = \sigma_{13} \cdot \cos \phi + \sigma_{23} \cdot \sin \phi \end{cases} \quad (\text{A-2.5})$$

S_1 et S_2 représentent les Constantes d'Elasticité Radiocristallographiques (CER), et sont directement proportionnelles aux constantes d'élasticité isotrope. Lorsque l'on trace un graphique représentant $\varepsilon_{\phi\psi}$ en fonction de $\sin^2\psi$, on obtient une ellipse inclinée. Sa pente et son ouverture sont proportionnelles respectivement à $\sigma_{\phi} - \sigma_{33}$ et à τ_{ϕ} .

Les mesures de diffraction des rayons X se faisant en surface de l'échantillon analysé, on considérera que la contrainte normale à la surface de l'échantillon (σ_{33}) est nulle. De plus, puisque la plupart des essais sera faite en condition de traction, on considère généralement que τ_{ϕ} est nul. Dans le cas d'un matériau isotrope et macro-homogène, on dispose donc d'un outil permettant de déterminer la contrainte d'ordre I pour la ferrite dans une direction ϕ donnée (dans notre cas, la direction de traction). On parlera de contraintes internes pour un matériau chargé, et de contraintes résiduelles pour des contraintes subsistant après décharge.

A-II.2.3 Méthode des Blocs De Cristaux (BDC), détermination des contraintes par orientation cristallographique

Cette méthode, d'abord développée pour l'analyse des matériaux à gros grains (où la sonde X n'interagit qu'avec un seul grain), a été étendue à l'analyse de contrainte pour les polycristaux [Ortner, 1986]. Elle permet en fait de déterminer l'état de contrainte dans plusieurs grains dont le réseau cristallin est orienté de manière proche. L'idée, relativement simple, consiste à mesurer la déformation élastique selon plusieurs directions de diffraction représentatives d'une orientation cristalline donnée, et à reconstruire le tenseur complet des déformations pour cette orientation. Le principe de cette mesure de déformation est le même que pour la méthode des $\sin^2\psi$, et il convient là aussi de choisir correctement les conditions d'analyse (angle θ maximal par exemple), pour obtenir un bon résultat.

La première étape consiste à choisir une orientation du réseau pour laquelle appliquer la méthode. On la repère généralement par les directions cristallographiques correspondant

à une direction macroscopique (de traction dans notre cas), et à la direction normale à l'échantillon. Si l'on ne considère que la partie du matériau dont le réseau est bien orienté de cette manière, le nombre de positions ($\phi ; \psi$) où les conditions de diffraction seront remplies sont limitées. Elles correspondent aux pôles des directions associées aux pics de diffraction sur la figure de pôles du monocristal orienté (voire l'exemple en figure A-II.8)).

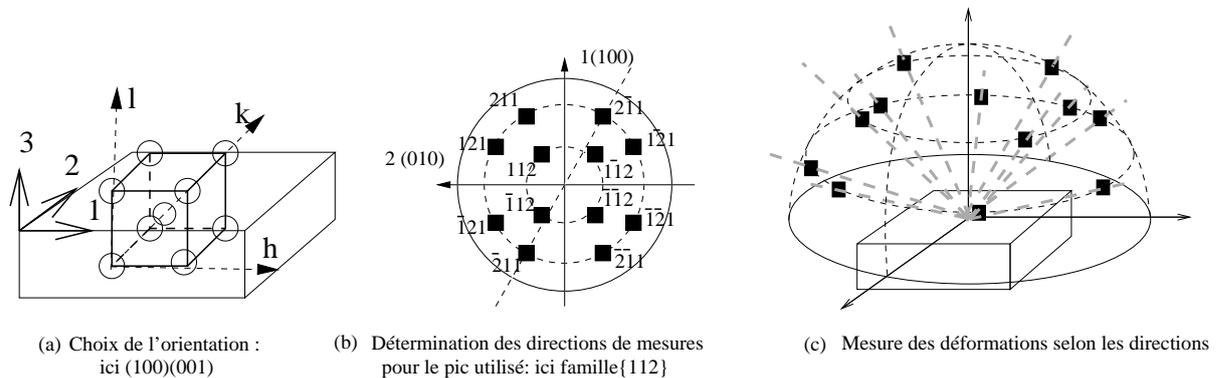


FIG. A-II.8 – Les étapes expérimentales de la méthode des Blocs De Cristaux (BDC).

On utilise ensuite les différentes déformations trouvées dans chaque direction pour déterminer le tenseur des déformations élastiques dans l'espace. L'hypothèse $\sigma_{33}=0$ est là aussi utilisée. La méthode nécessite de déterminer un nombre minimal de 6 pics répartis dans l'espace afin d'être résolue, l'utilisation d'un nombre maximal de pics garantissant la réduction de l'incertitude de détermination de contrainte estimée automatiquement sur chacune des composantes du tenseur de contrainte. Enfin, et c'est là un de ses principaux avantages, elle permet de s'affranchir de l'utilisation du paramètre de maille du matériau non contraint, en faisant l'hypothèse $\sigma_{33}=0$.

A-II.3 Difficultés expérimentales liées à la machine de traction *in-situ* - étalonnage

Le calcul de la déformation macroscopique a posé quelques problèmes avec la machine de traction *in-situ* : en effet, il n'existe pas de relation directe entre l'indication du capteur de déplacement des mors fourni sur la machine et la déformation de la partie utile de l'éprouvette. Plusieurs autres biais ont été mise en évidence : le premier est une rigidité insuffisante de la machine de traction, ajoutée au fait que l'éprouvette n'est pas alignée dans le plan de la chaîne cinématique d'effort fait que la traction n'est pas parfaitement plane.

Le second tient à la géométrie en double décrochement des éprouvettes qui peut avoir une influence sur la linéarité du comportement de l'ensemble. Afin de pouvoir fournir une estimation correcte de la déformation, il a été procédé à plusieurs étalonnages de la machine,

à température ambiante, et en équipant des éprouvettes de type A de différentes épaisseurs (0,5 et 1 mm) de jauges de déformation. Cela a permis de montrer, pour cette géométrie d'éprouvette (mais pas à la bonne température), que la relation entre le déplacement mesuré et la déformation de l'éprouvette est linéaire, mais que le coefficient était différent selon que le comportement de la partie utile de l'éprouvette était élastique ou plastique. En effet, la mesure de déplacement inclut l'éprouvette, mais aussi les mors, le système du capteur de contrainte, et les supports des vis sans fin, pas seulement la partie utile de l'éprouvette.

Trois méthodes pour estimer la déformation sont alors envisagées :

- Utiliser basiquement l'indication du capteur de déplacement et en déduire la déformation de la zone utile comme étant le déplacement divisé par la longueur utile. Cette méthode donne des résultats en déformation très importants, et fournit des pentes en charge et décharge élastique complètement farfelues. Elle a été écartée.
- Mesurer une longueur donnée sur la zone utile de l'éprouvette, et suivre son évolution. C'est la méthode idéale, souvent employée lors d'essais standards (grâce à des extensomètres), mais pour des raisons d'encombrement (présence du cooler empêchant de positionner un extensomètre), et d'atmosphère protectrice (obligation de garder la machine sous flux d'azote, empêchant une mesure directe aux instruments), elle n'a pu être utilisée. Il se produit de toute façon en fin d'essai une localisation de déformation (même à -150°C , il est rare que des éprouvettes lisses cassent de manière fragile avec cette machine). Essayer de mesurer après coup la déformation pour caler la courbe de traction par rapport à la déformation à rupture ne pourrait être acceptable que si cette localisation ne survenait pas.
- Enfin, il a été tenté d'utiliser les relations linéaires fournies par les essais d'étalonnage. Plus simplement, le coefficient de proportionnalité entre déformation de la zone utile et indication du capteur de déplacement des mors "en élasticité" a été utilisé pour les charges et décharges élastiques, alors que le coefficient "en plasticité" a été utilisé pour les phases de plasticité. C'est finalement cette méthode qui a été retenue. La figure A-II.9 présente cette courbe.

Les résultats obtenus sont relativement satisfaisants. Le module d'Young pour les décharges n'est pas très bien reproduit avec une erreur maximale de 20% pour la dernière décharge, mais les déformations à rupture sont cohérentes avec les résultats obtenus par [Tanguy, 2001] et [Renevey, 1998] sur des matériaux similaires. Notons que certains résultats obtenus dans [Pesci, 2004] diffèrent assez largement, notamment au niveau de la déformation à rupture bien plus faible, ce qui peut s'expliquer par le fait que les essais ont été menés sur un matériau légèrement différent, et sur des géométries entaillées.

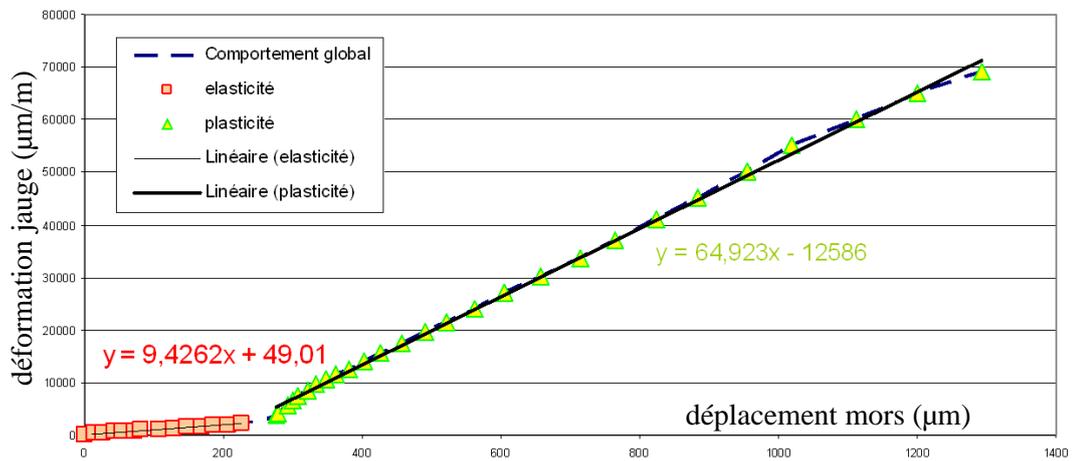


FIG. A-II.9 – Étalonnage de la machine de traction à température ambiante. Relation entre le déplacement des mors mesuré par capteur inductif et la déformation d'une éprouvette de type B mesurée par une jauge d'extensométrie.

Annexe -A-III-

Calcul de microstructure

Sommaire

A-III.1	Technique des polyèdres de Voronoï	247
A-III.2	Les conditions aux limites en calcul de microstructure.	249
A-III.2.1	Conditions aux limites périodiques (CLP)	249
A-III.2.2	Déformation Homogène au Contour (DHC)	250
A-III.2.3	Contrainte homogène au contour (CHC)	251
A-III.2.4	Effet des CAL	252

A-III.1 Technique des polyèdres de Voronoï

Les techniques de génération de structures en grains sont directement inspirées du processus physique à la base de la croissance des grains dans les polycristaux. Dans les matériaux métalliques on peut considérer, en partant de la phase liquide, que la cristallisation s'effectue depuis un germe pour s'étendre de manière isotrope selon une vitesse définie par la physique de diffusion. Le seul obstacle définitif à la croissance d'un grain sera sous cette hypothèse sa rencontre avec un autre grain en cours de formation, ce qui formera une interface entre les deux (un joint de grains).

Le processus des polyèdres de Voronoï reproduit ce phénomène. En partant de germes aléatoirement répartis dans un volume, il permet de faire croître des volumes en 3D ou des surfaces en 2D (les grains) dont les interfaces (les joints) seront planes ou linéaires. Cette technique proposée dans [Gilbert, 1962], a notamment été utilisée dans [Canova et al., 1992]. Elle a été étendue et adaptée aux générations de microstructures 3D [Decker et Jeulin, 2000], tout en y apportant de nombreuses améliorations permettant un meilleur contrôle sur la morphologie des agrégats générés. La figure A-III.1 illustre le principe de la méthode.

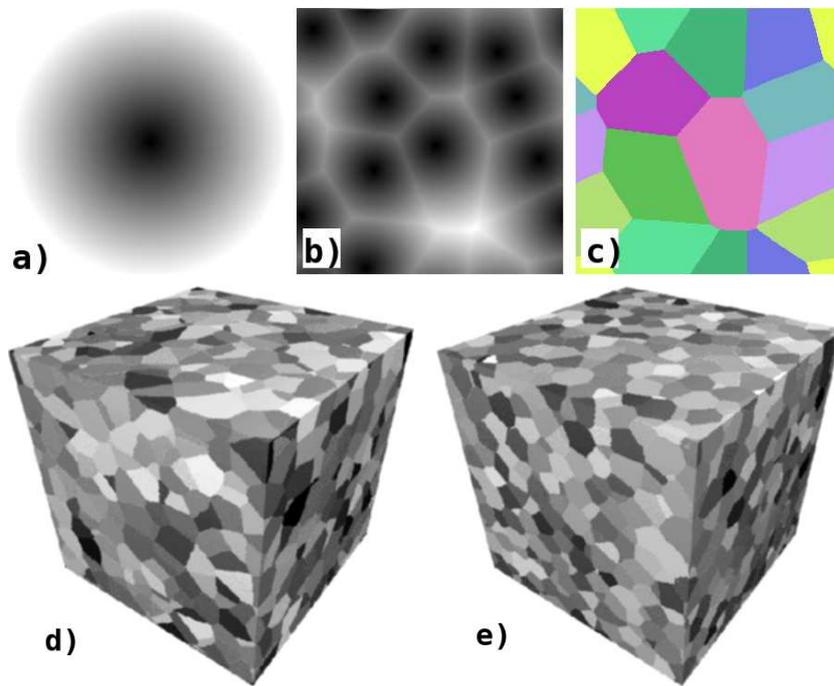


FIG. A-III.1 – Illustration de la méthode de création des polyèdres de Voronoï d’après [Barbe, 2000] : a) Fonction de distance associé à chaque germe (2D). b) Fonction de distance associée à plusieurs germes (2D). c) Résultat final après reconstruction des polyèdres de Voronoï (2D). d) Un exemple de microstructure à 1000 grains générée avec répartition des germes selon un processus de Poisson (3D). Un exemple de microstructure à 1400 grains générée en prenant en compte une zone d’influence de répulsion entre les germes (3D).

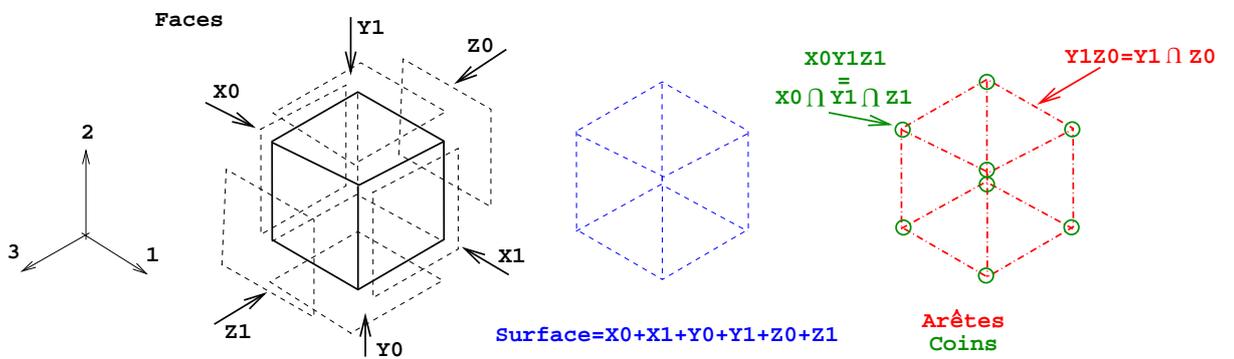


FIG. A-III.2 – Les dénominations utilisées pour l’application des conditions aux limites sur la géométrie du VER.

A-III.2 Les conditions aux limites en calcul de microstructure.

Cet aspect concerne les calculs éléments finis de microstructure, tels que les agrégats polycristallins ou les composites. En effet il convient de discuter cet aspect du calcul, qui devient primordial puisque les résultats peuvent être dépendants des Conditions Aux Limites (CAL) choisies.

Afin d'illustrer ces considérations, nous considérons ici un VER de forme cubique auquel nous voulons imposer un chargement. La géométrie de ce problème est représentée sur la figure A-III.2.

Imposer, par exemple, une traction uniaxiale pure à un VER hétérogène et élastoplastique s'avère être une tâche relativement subtile. Différentes façons de faire peuvent être envisagées, selon qu'on impose des déplacements ou des forces aux noeuds (i.e. respectivement une contrainte ou une déformation à la surface du VER).

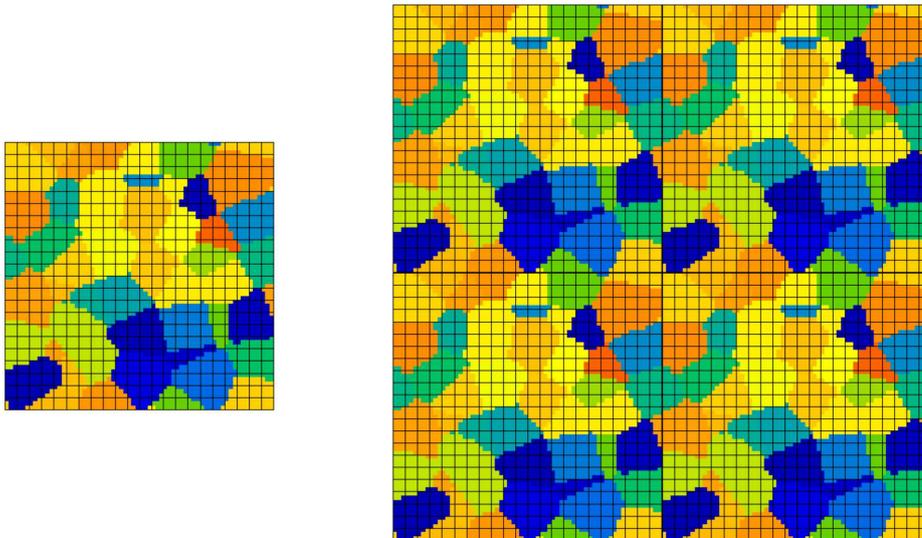


FIG. A-III.3 – Illustration des propriétés de périodicité du maillage sur la face Y1 du maillage à 200 grains.

A-III.2.1 Conditions aux limites périodiques (CLP)

Cela revient à imposer à la surface des déplacements moyens selon les différentes directions plus une variation périodique des degrés de liberté à la surface. Le vecteur déplacement s'écrit alors :

$$\underline{u}_G = \underline{\mathbf{E}}\underline{x} + \underline{v}_G(\underline{x}) \quad (\text{A-3.1})$$

où \underline{x} représente le vecteur position, $\underline{\mathbf{E}}$ le tenseur de déformation moyen, et G le groupe de noeuds concernés par une des conditions de périodicité. On impose ainsi une condition de périodicité entre les faces Y_0 et Y_1 par exemple : le déplacement moyen sera laissé libre ou imposé, mais les variations autour de ce déplacement moyen ($\underline{v}_G(\underline{x})$) seront imposées comme communes aux deux surfaces. Ce type de chargement nécessite que le maillage ait été généré lui aussi de manière périodique (figure A-III.3). Enfin, il est primordial de distinguer lors de l'application des conditions de périodicité l'intérieur des faces, la partie intérieure des arêtes et les coins du VER. Ce type de CAL sera la meilleure représentation du VER plongé dans un milieu infini, et n'engendrera aucune perturbation géométrique (et donc des champs mécaniques) près des surfaces des maillages.

L'application de ces conditions aux limites a toutefois été abandonnée dans ces travaux, car elle entraînait une augmentation drastique des temps de calculs, y compris en réduisant les domaines d'étude (et donc en s'éloignant d'un VER pour le volume d'étude).

A-III.2.2 Déformation Homogène au Contour (DHC)

Ce type de CAL permet d'imposer à chaque noeud de la surface un vecteur déplacement \underline{u} selon :

$$\underline{u}_{Surface} = \underline{\mathbf{E}} \cdot \underline{x} \quad (\text{A-3.2})$$

Ce type de CAL est très proche des conditions précédentes, à ceci près qu'on y substitue les conditions de périodicité à une condition de planéité, ce qui allège notablement la résolution globale EF. On constate toutefois que l'on impose aux faces de VER de rester planes ce qui induit une perturbation des champs mécaniques à proximité de la surface. Ce type de conditions aux limites permet aussi d'appliquer un cisaillement sur le VER et sera privilégié dans le cas où le VER n'a pas un comportement macroscopiquement isotrope.

a) Déformation à imposer

Le problème est alors de connaître par avance le tenseur de déformation à imposer à la surface du VER. Dans l'exemple de la traction uniaxiale, il s'agira non seulement de "tirer" sur deux faces, mais aussi de savoir si l'on impose ou non les contractions latérales dues à l'effet de Poisson. Si on les impose, reste aussi à savoir comment. Toujours en prenant exemple sur la traction uniaxiale, les possibilités de mise en oeuvre seront :

- Imposer la traction uniquement par un déplacement relatif de deux faces.
- Imposer un champ de déformation approximé isovolume. Typiquement, de nombreux travaux appliquent un chargement de type $\{\varepsilon_{11} = a, \varepsilon_{22} = a/2, \varepsilon_{33} = a/2\}$ au VER. Ce type de chargement peut être accepté en première approximation, mais on ne doit pas perdre de vue qu'on ne décrit alors pas bien la partie élastique de la déformation macroscopique du VER, ce qui entraîne un biais sur l'ensemble du comportement.

- Imposer un champ de déformation approximé tiré d'un modèle d'homogénéisation. Cette démarche a, là aussi, été explicitée dans [Barbe, 2000]. Le champ de déformation $\underline{\underline{E}}$ appliqué au VER est cette fois le champ préalablement déterminé par un modèle d'homogénéisation, ce qui permet par exemple de bien décrire le changement de volume dû à la partie élastique de la déformation.

b) Déplacement Normal Imposé (DNI)

Afin de simplifier l'utilisation des CAL de DHC, Barbe propose pour les VER parallélépipédiques polycristallins de n'imposer que le déplacement nodal normal aux faces, en laissant libre le déplacement nodal dans le plan des faces.

Barbe démontre [Barbe, 2000] que les résultats sont très proches de ceux des conditions DHC.

A-III.2.3 Contrainte homogène au contour (CHC)

Ce type de CAL permet d'imposer à chaque noeud de la surface un vecteur force \underline{f} selon :

$$\underline{f}_{Surface} = \sum \underline{n} \cdot dS \quad (A-3.3)$$

où \underline{n} représente la normale extérieure à la surface du VER au noeud considéré, et dS l'unité de surface associée au noeud.

a) Chargement à imposer - évolution de la géométrie

Imposer un champ de contrainte sur les faces, n'est donc pas trivial, la géométrie (et donc la valeur locale de dS) évoluant en cours de chargement et nécessitant un couplage entre les forces imposées aux noeuds et cette évolution. Ce type d'approche sera facilité dans le cas présent, puisque le chargement à contrainte imposée sur une surface dont la géométrie évolue est disponible dans le code de calcul ZéBuLon. Il faut dans le cas où l'on utilise ces conditions se poser la question du traitement de la géométrie de la surface.

b) Déplacements des surfaces

Surface Libre (SL) : Cette condition revient à laisser l'ensemble des degrés de liberté en déplacement libres sur les noeuds de la face concernée. De fait, si l'on considère que le RVE est aussi le MHE, on se rend bien compte que les noeuds et éléments à la surface verront leur comportement perturbé par la proximité de la surface libre, ce qui aura tendance à provoquer un adoucissement "parasite" de cette partie du maillage. En effet la condition de contrainte nulle à la surface se justifie pleinement macroscopiquement, mais n'est pas acceptable localement, si l'on considère le VER comme plongé dans un milieu infini environnant.

Cet effet a été étudié dans [Barbe, 2000]. Il provoque une perturbation des diverses variables internes sur une épaisseur d'environ 4 noeuds, ainsi qu'un adoucissement du comportement global du VER. Toutefois ce type de CAL pourra voir son emploi justifié, par exemple lorsque l'effet de surface libre est utile ou représentatif de ce que l'on veut simuler.

Planéité de Surface Imposée (PSI) : Afin d'éviter l'assouplissement induit par les SL, on peut choisir d'imposer que les faces du VER restent planes en imposant l'égalité d'un degré de liberté en déplacement de tous les noeuds d'une face (mais sans imposer la valeur) :

$$u_n(G) = cste \quad (\text{A-3.4})$$

On peut voir cette façon de faire comme une CAL "quasi-périodique" acceptable (bien qu'imposer la planéité ne se justifie pas), car son coût numérique est très raisonnable. Les commandes de type multi-point constraint (mpc) sont dédiées à ce type de chargement avec le code ZéBuLon.

Il conviendra de s'assurer dans ce cas, qu'aucune composante de cisaillement n'intervient dans le chargement macroscopique. On utilisera cette possibilité afin d'obtenir le même comportement pour un VER chargé en condition de CHC, que celui qui est chargé en DHC.

A-III.2.4 Effet des CAL

Barbe a comparé les réponses d'un agrégat sollicité en traction uniaxiale, mais soumis à différents types de CAL, avec le même agrégat modélisé par une modélisation de type BZ.

On remarque que les conditions dénommées HBC (Homogeneous Boundary Conditions, équivalent aux DHC) permettent d'obtenir une réponse macroscopique cohérente entre le modèle d'homogénéisation et l'agrégat. Viennent ensuite les conditions MBC (Mixed Boundary Conditions, équivalentes au DNI avec prescription des déformations du BZ), et enfin les conditions DNI à 1 puis 4 faces libres.

On note aussi sur la figure A-III.4.b) que les contractions latérales sont relativement proches quelles que soient les CAL utilisées, et surtout que l'application de la déformation tirée d'une modélisation BZ est une solution efficace au problème de prescription des contractions latérales.

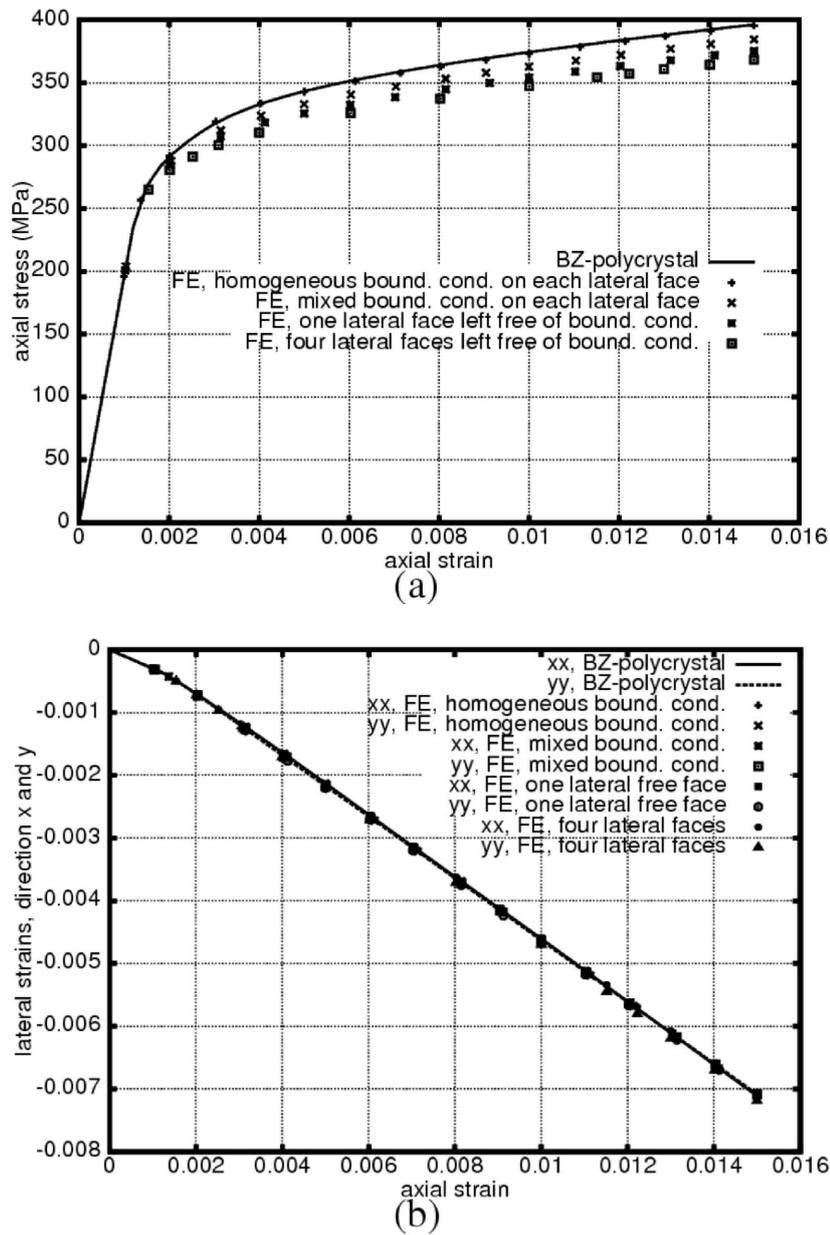


FIG. A-III.4 – Effet des différents types de conditions aux limites appliquées aux VER en traction uniaxiale sur : a) Son comportement macroscopique. b) les contractions latérales. [Barbe, 2000]

Annexe -A-IV-

Choix de modélisation pour la ferrite

Sommaire

A-IV.1	Dénomination des systèmes de glissement	255
A-IV.2	Équivalence entre élastoplasticité et élasto-viscoplasticité	255
A-IV.3	Écrouissage	258
A-IV.3.1	Choix de la formulation isotrope	258
A-IV.3.2	Forme de la matrice d'écrouissage	258
A-IV.3.3	Implémentation dans le code de calcul	258

A-IV.1 Dénomination des systèmes de glissement

Afin de garder une dénomination cohérente pour les systèmes considérés, on attribue ici un nombre à chacun des systèmes considérés. Cette notation a court dans tout le manuscrit, et est donnée au tableau A-IV.1.

A-IV.2 Équivalence entre élastoplasticité et élasto-viscoplasticité

Des simulations d'un cycle de traction-compression uniaxiale ont donc été effectuées pour différentes vitesses de déformation sur un monocristal de ferrite en utilisant le jeu de paramètre arbitraire donné au tableau A-IV.2. Le pilotage se fait en déformation.

L'élasticité est isotrope, les cissions critiques ainsi que la formulation de l'écrouissage sont les mêmes pour les deux familles de glissements. Celui-ci est isotrope et cinématique, et

n° système	$m^g : n^g$	n° système	$m^g : n^g$
1	$(\bar{1}01) : [111]$	13	$(\bar{2}11) : [111]$
2	$(0\bar{1}1) : [111]$	14	$(1\bar{2}1) : [111]$
3	$(\bar{1}10) : [111]$	15	$(11\bar{2}) : [111]$
4	$(\bar{1}01) : [1\bar{1}1]$	16	$(121) : [1\bar{1}1]$
5	$(011) : [1\bar{1}1]$	17	$(\bar{1}12) : [1\bar{1}1]$
6	$(110) : [1\bar{1}1]$	18	$(21\bar{1}) : [1\bar{1}1]$
7	$(0\bar{1}1) : [\bar{1}11]$	19	$(211) : [\bar{1}11]$
8	$(110) : [\bar{1}11]$	20	$(12\bar{1}) : [\bar{1}11]$
9	$(101) : [\bar{1}11]$	21	$(1\bar{1}2) : [\bar{1}11]$
10	$(\bar{1}10) : [11\bar{1}]$	22	$(112) : [11\bar{1}]$
11	$(101) : [11\bar{1}]$	23	$(2\bar{1}1) : [11\bar{1}]$
12	$(011) : [11\bar{1}]$	24	$(\bar{1}21) : [11\bar{1}]$

TAB. A-IV.1 – Liste des 24 systèmes de glissements considérés pour la déformation par glissement plastique de la ferrite. La dénomination des systèmes de glissement restera la même dans tout le manuscrit.

E	ν	τ_{c0}	Q	b	h^{gh}	n	k	c	d
210 GPa	0,3	120 MPa	20	40	{1}	5	12	4000	100

TAB. A-IV.2 – Les paramètres **arbitraires** utilisés pour vérifier l'équivalence des formulations élastoplastique et élastoviscoplastique.

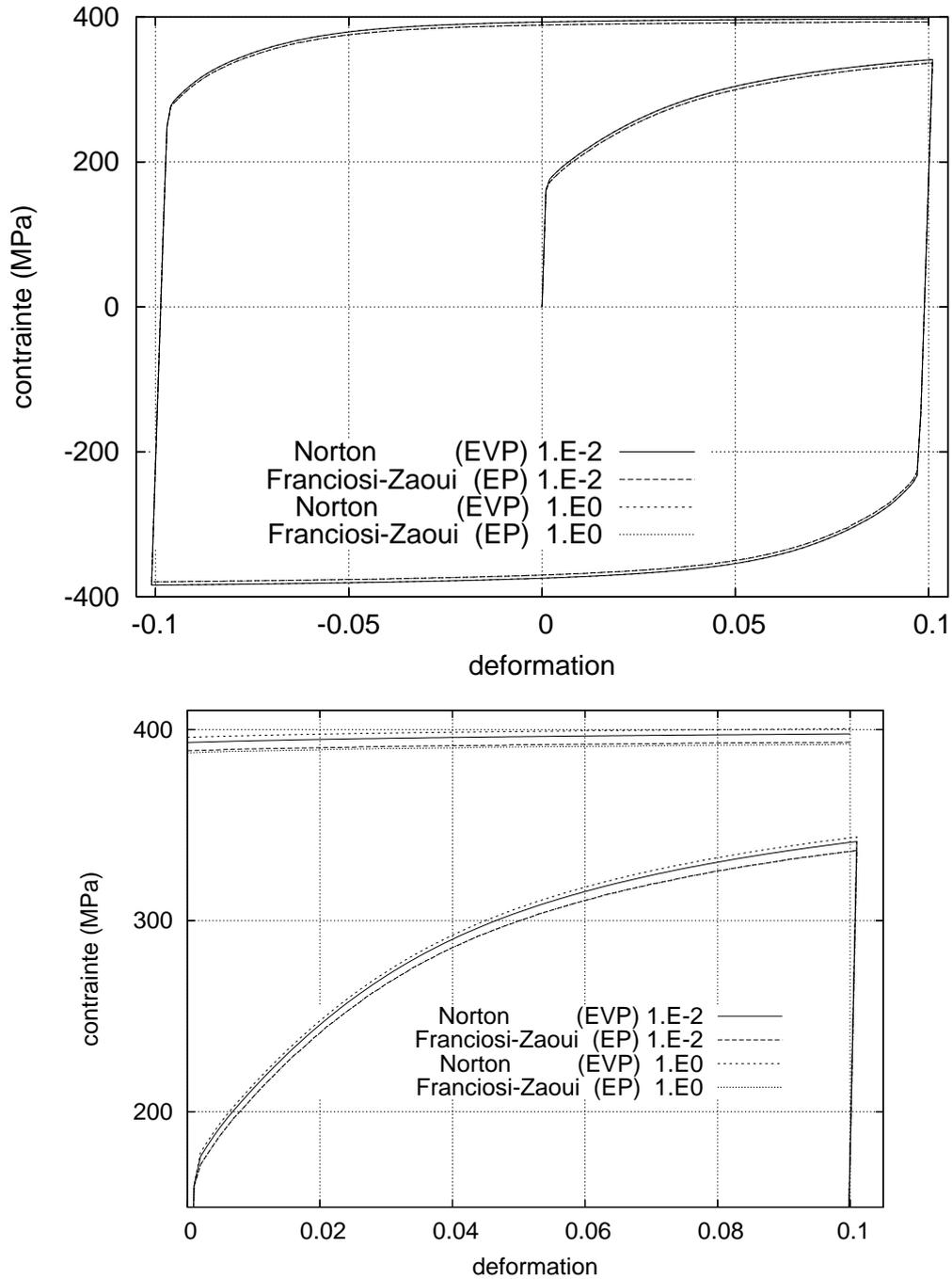


FIG. A-IV.1 – Comparaison des comportements élasto-plastique pur et élasto-viscoplastique à faible viscosité pour un monocristal de ferrite. Orientation choisie : $\varphi_1 = 15^\circ, \phi = 12^\circ, \varphi_2 = 8^\circ$.

tous les coefficients sont les mêmes pour les différentes familles de systèmes de glissement. Aucune rotation n'a été introduite.

Comme montré par la figure A-IV.1, on observe une similitude de comportement macroscopique, malgré des vitesses de déformation équivalentes relativement élevées (1. et $10^{-2} s^{-1}$), sachant que les simulations se feront à des vitesses largement inférieures (de l'ordre de $10^{-4} s^{-1}$). Il faut noter que pour cette vitesse, les courbes de comportement du monocristal étaient quasi confondues pour les deux formulations élastoplastique et élasto-viscoplastique.

On peut aussi comparer les valeurs des glissements sur chacun des systèmes pour vérifier l'équivalence des formulations. Celles-ci montrent bien l'équivalence en termes de glissements (figure A-IV.2). Il faut toutefois noter que dans le cas visqueux, on active parfois très faiblement un ou plusieurs systèmes qui n'auraient pas été activés dans le cas élastoplastique pur. Les valeurs sur ces systèmes sont néanmoins négligeables.

Dans le cadre d'une implémentation de loi de comportement monocristalline, l'utilisation de la formulation de type Norton à faible viscosité pour décrire un comportement élastoplastique se fera sans réserve pour des vitesses de chargement quasi statiques.

A-IV.3 Ecrouissage

A-IV.3.1 Choix de la formulation isotrope

La différence entre l'écrouissage exponentiel, qui permet une saturation de la montée en contrainte et l'écrouissage linéaire est montrée dans la figure A-IV.3.

A-IV.3.2 Forme de la matrice d'écrouissage

La forme de la matrice d'écrouissage est donnée au tableau A-IV.3

A-IV.3.3 Implémentation dans le code de calcul

Le code utilisé pour les calculs éléments finis est le code ZéBuLon, fourni par le Centre des Matériaux de l'École Nationale Supérieure des Mines de Paris. Ce code a été choisi pour sa flexibilité, liée en grande partie à sa programmation orientée objet [Besson et Foerch, 1997, Foerch et al., 1997]. Par exemple, dans le cadre des calculs, on pourra définir une loi de comportement liée aux cubiques centrés, et l'utiliser aussi bien directement comme loi de comportement aux points de Gauss, qu'en l'incluant dans un modèle de transition d'échelles, lui-même utilisable directement comme loi de comportement. De plus, la version utilisée dispose nativement des modules de génération de maillages d'agrégats.

Par défaut, cette version du code permettait pour les lois de comportement de plasticité cristalline une prise en compte des 24 systèmes de glissements considérés pour la ferrite,

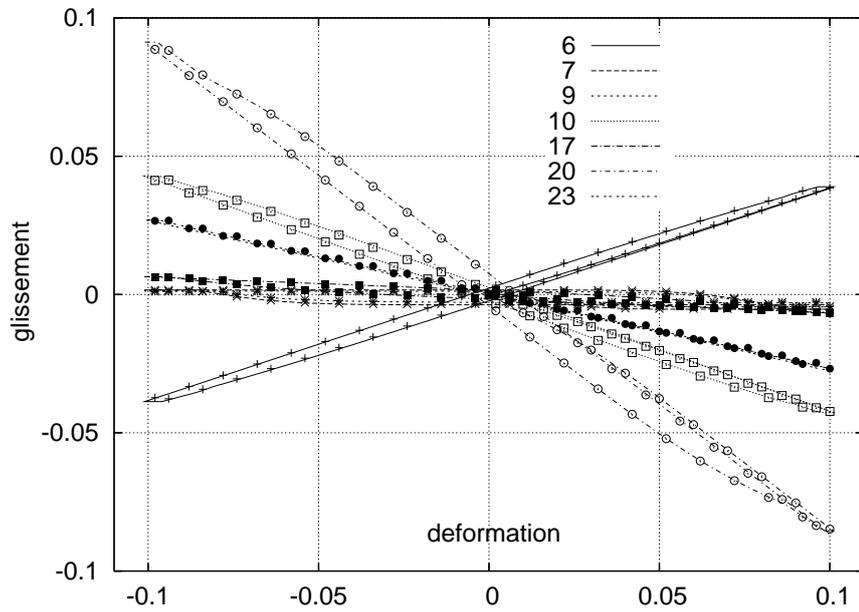


FIG. A-IV.2 – Comparaison des glissements sur les systèmes activés pour le cycle traction-compression du monocristal de la figure A-IV.1, les résultats symbolisés par lignes sont ceux de la modélisation élastoplastique, les autres étant leurs équivalents en modélisation élasto-viscoplastique pour une vitesse de $10^{-2} s^{-1}$.

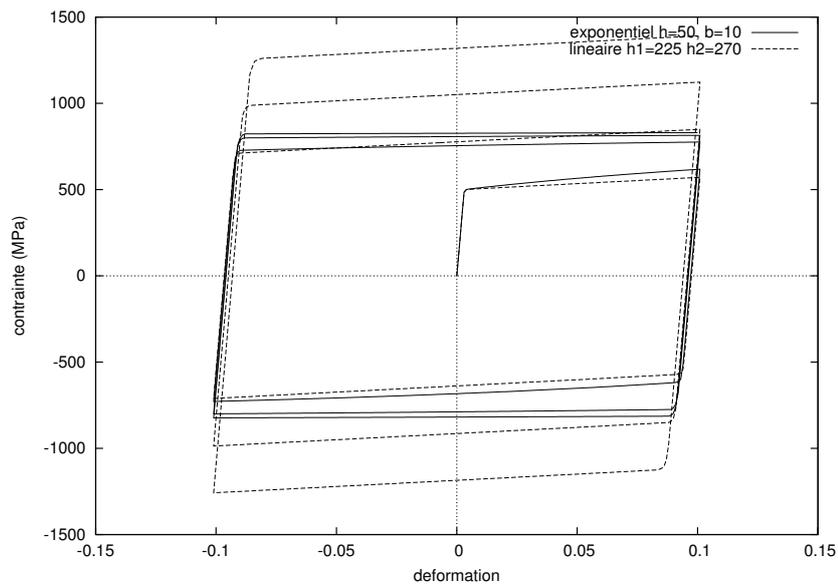


FIG. A-IV.3 – L'écrouissage exponentiel saturant permet dans le cas de chargements à forte déformation cumulée une atténuation progressive du taux d'écrouissage.

	1 2 3	4 5 6	7 8 9	1 1 1 0 1 2	1 1 1 3 4 5	1 1 1 6 7 8	1 2 2 9 0 1	2 2 2 2 3 4
1	2 2 2	2 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1
2	2 2 2	1 1 1	2 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1
3	2 2 2	1 1 1	1 1 1	2 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1
4	2 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1
5	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 2	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1
6	1 1 1	2 2 2	1 2 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1
7	1 2 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1
8	1 1 1	1 1 2	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1
9	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 2 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1
10	1 1 2	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2
11	1 1 1	1 1 1	1 1 2	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2
12	1 1 1	1 2 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2
13	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	4 4 4	3 3 3	3 3 3	3 3 3
14	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	4 4 4	3 3 3	3 3 3	3 3 3
15	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	4 4 4	3 3 3	3 3 3	3 3 3
16	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	3 3 3	4 4 4	3 3 3	3 3 3
17	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	3 3 3	4 4 4	3 3 3	3 3 3
18	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	3 3 3	4 4 4	3 3 3	3 3 3
19	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	3 3 3	3 3 3	4 4 4	3 3 3
20	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	3 3 3	3 3 3	4 4 4	3 3 3
21	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	3 3 3	3 3 3	4 4 4	3 3 3
22	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	3 3 3	3 3 3	3 3 3	4 4 4
23	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	3 3 3	3 3 3	3 3 3	4 4 4
24	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	3 3 3	3 3 3	3 3 3	4 4 4

TAB. A-IV.3 – La forme de la matrice d'écroutissage implémentée pour les 24 systèmes des cubiques centrés. Les chiffres 1 2 3 et 4 représentent respectivement les coefficients h_1 h_2 h_3 et h_4 . La dénomination des systèmes est la même que celle donnée au tableau A-IV.1.

mais pas la prise en compte des interactions entre les systèmes des deux familles différentes par l'intermédiaire de la matrice d'écrouissage h^{gh} . Seules les interactions des systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{110\}$ entre eux et des systèmes de la famille $\langle 111 \rangle \{112\}$ entre eux pouvaient être mis en place, ce qui n'a pas été considéré comme suffisant.

Une nouvelle loi de comportement de plasticité cristalline a donc été implémentée. Elle prend en compte les 24 systèmes de glissement présentés au tableau A-IV.1. En s'inspirant des travaux présentés dans [Hoc et Forest, 2001] et [Lipinski, 1992], une matrice d'écrouissages h^{gh} de 24x24 termes à quatre paramètres a été implémentée, afin de tenir compte des différentes interactions fortes et faibles entre systèmes. Cette matrice est illustrée par le tableau A-IV.3.

Annexe -A-V-

Prise en compte du champ de contrainte corrigé pour l'étude de la rupture

On a évoqué lors de la vérification des champs de contrainte au sein du composite ferrite/cémentite la nécessité d'utiliser une correction pour le champ de contrainte. Un problème se pose : la correction de contrainte sera-t-elle aussi nécessaire pour les calculs sur agrégats ? En effet, la partie concernant la rupture de ces travaux porte sur un critère en contrainte local ce qui pose deux problèmes potentiels :

- **Pertinence du champ de contrainte corrigé** : on peut avoir une bonne confiance dans les résultats de contrainte moyenne sur l'élément, mais on ne peut pas omettre que ce seront des résultats moyennés, qui perdent donc de leur intérêt dans une approche qui se veut locale à l'échelle de la microstructure.
- **Impossibilité d'appliquer la correction** : on ne peut pas légitimement appliquer la correction décrite à l'équation 4.40 qu'à la condition que le comportement soit le même au sein de tout l'élément. Or cette condition n'est plus respectée dans les calculs d'agrégats où un même élément pourra inclure des points d'intégration attachés à des grains différents. Effectuer une moyenne dans ce cas n'a *a priori* plus de sens.

Ce sont ces constatations qui font que la discrétisation des maillages a été augmentée pour les calculs triaxiaux du chapitre suivant : comme le signalait déjà Barbe, une meilleure discrétisation du maillage diminue les hétérogénéités de contraintes au sein de l'élément, minimisant le problème de pression. Dans le cas de ces calculs, qui seront faits pour de fortes triaxialités, on ajoute que la pression sera sensiblement plus élevée que pour les chargements

uni-axiaux. La déformation élastique ne sera donc plus aussi petite devant la déformation totale.

Toutefois, pour le calcul à plus faible triaxialité et à plus hautes températures, le problème se pose tout de même : les champs de contrainte sont fortement perturbés.

Afin de d'observer qualitativement l'effet de la correction, on observe son influence sur la distribution des contraintes effectives de clivage au niveau des points d'intégration, observable pour un cas très fortement perturbé, le calcul T6 pour $\Sigma_I=2500$ MPa (figure A-V.1.a).

Ainsi, bien que l'utilisation de la correction ne soit pas justifiée pour les éléments multiphasés, elle semble donner de bons résultats pour les calculs très perturbés.

Ce qui empêche en théorie d'utiliser cette correction ici est que faire la moyenne des pressions sur un élément ou plusieurs phases (orientations) différentes coexistent n'a *a priori* pas de sens. Néanmoins, dans le cas où cette opération n'aurait pas d'effet néfaste sur la représentation des contraintes, on préférerait travailler sur le champ corrigé, qui bien que non-justifié, est certainement plus valide que le champ perturbé. De plus, seuls certains éléments aux interfaces entre grains sont multiphasés, ce qui minimise quelque peu le problème.

Un moyen de vérifier cela est de comparer l'effet de la correction sur un calcul où il existe des fortes hétérogénéités de contraintes au sein des éléments multiphasés, mais peu de perturbations dues à de forts niveaux de déformation plastique. Cette comparaison est effectuée à la figure A-V.1.b. On y montre l'effet de la correction sur la répartition des contraintes en début de plasticité.

On voit bien au final que la correction a un effet sur la répartition des contraintes, mais que cet effet est de loin préférable à l'utilisation du champ de contraintes perturbé. Le champ corrigé de la figure A-V.1.a, même s'il met en évidence un effet de moyenne par élément montre que les surcontraintes aux joints sont bien reproduites, contrairement à ce que l'on observe pour le champ non-corrigé qui est manifestement inutilisable.

On utilisera donc le champ de contraintes corrigé. On a vérifié que son influence sur la répartition des contraintes de clivage était négligeable. De la même façon, on peut vérifier son effet sur probabilité de rupture cumulée de l'agrégat, là aussi dans un cas où les perturbations ne sont pas encore apparues (calcul fortement triaxié T4, et donc peu perturbé). Cette comparaison est faite à la figure A-V.2, et montre que l'effet est là encore négligeable.

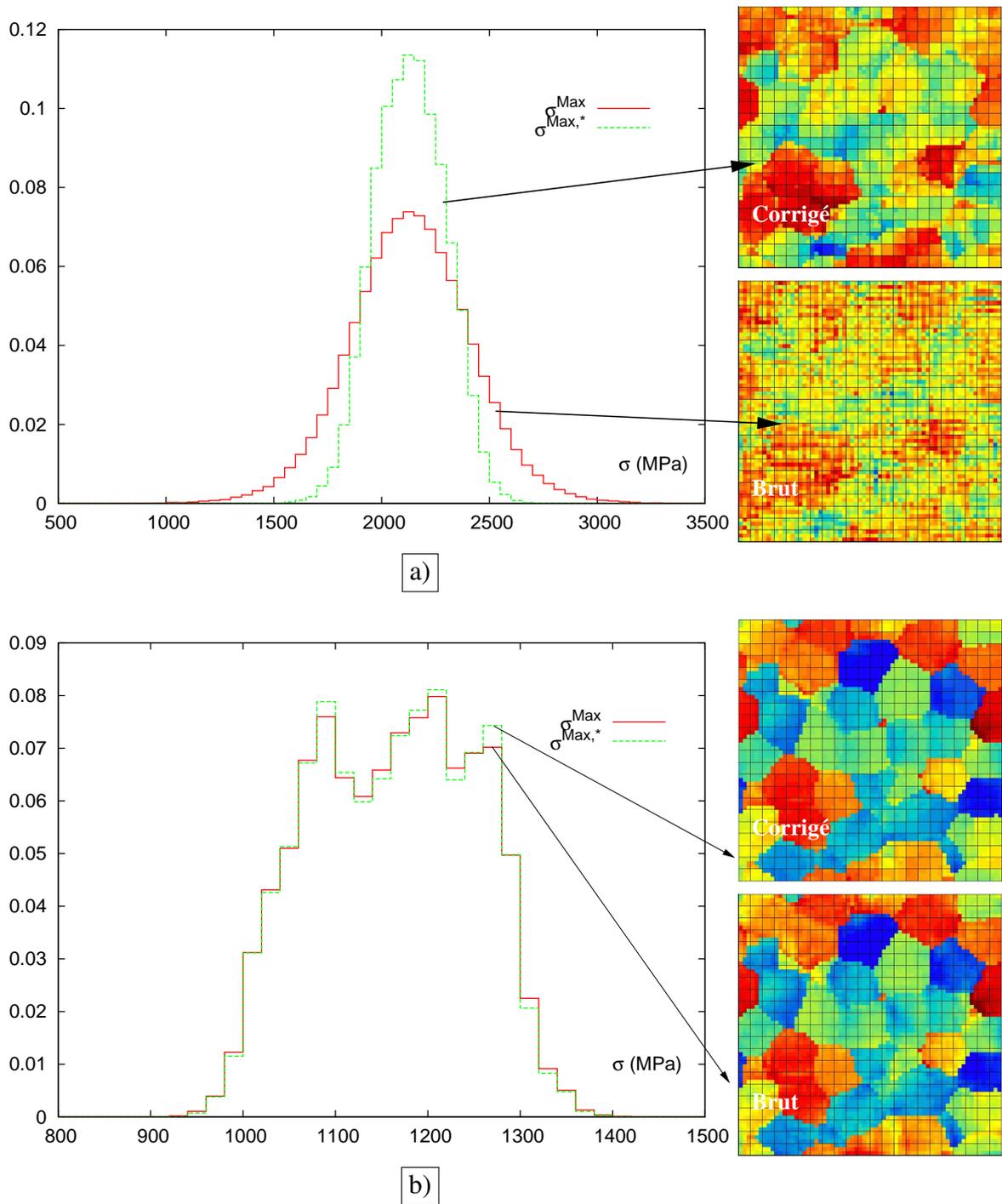


FIG. A-V.1 – Illustration de la différence entre la répartition de contrainte effective de clivage tirée du champ de contrainte brut (σ^{Max}) et tirée du champ corrigé ($\sigma^{Max,*}$). Calcul T6 (-90°C, $\chi=2$). Histogrammes de répartition de la contrainte maximale effective sur les plans de clivage, et champ observé selon une coupe médiane perpendiculaire à l'axe 3 : a) pour $\Sigma_I=2500$ MPa (champ de contrainte très perturbé), b) pour $\Sigma_I=1300$ MPa (champ de contrainte peu perturbé).

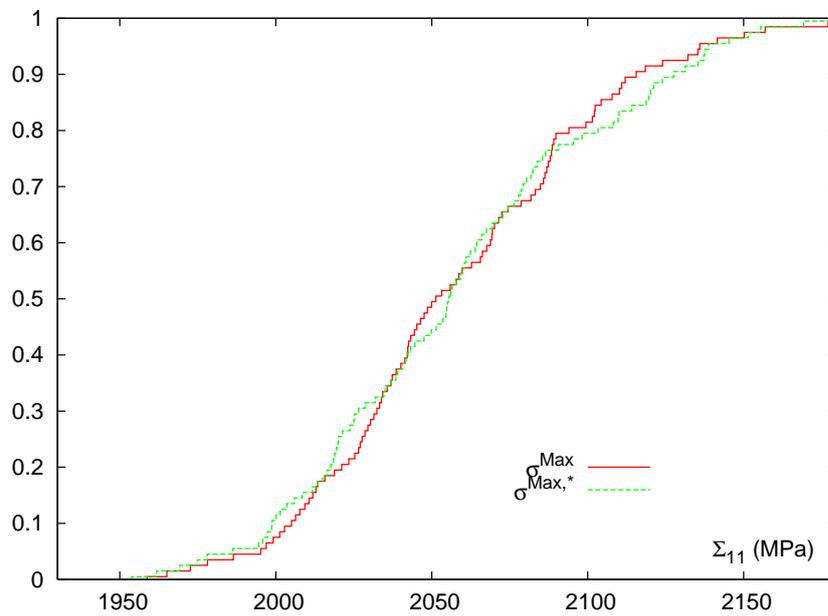


FIG. A-V.2 – Effet de la correction du champ de contrainte sur la probabilité de rupture cumulée du VER en fonction de la première contrainte principale dans le cas d'un calcul où les perturbations dues à la déformation plastique sont très faibles, le calcul T4 (-150°C, $\chi=3$). On voit bien que la correction ne modifie pas le résultat.

Bibliographie

- [Barbe, 2000] BARBE F. (2000). *Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- [Belassel, 1994] BELASSEL M. (1994). *Etude de la distribution des contraintes d'ordres I et II par diffraction des rayons X dans un acier perlitique*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- [Besson et Foerch, 1997] BESSON J. ET FOERCH R. (1997). *Large scale object-oriented finite element code design*. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., vol. 142, pp 165–187.
- [Canova et al., 1992] CANOVA G.R., WENK H.R, ET MOLINARI A. (1992). *Deformation modelling of multi-phase polycrystals : case of quartz-mica aggregate*. Acta Metall., vol. 40, pp 1519–1530.
- [Decker et Jeulin, 2000] DECKER L. ET JEULIN D. (2000). *Simulation 3D de matériaux aléatoires polycristallins*. Rev. Métall./CIT Sc. et Tech. des Mat., vol. , pp 271–275.
- [Foerch et al., 1997] FOERCH R., BESSON J., CAILLETAUD G., ET PILVIN P. (1997). *Polymorphic constitutive equations in finite element codes*. Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., vol. 141, pp 355–372.
- [Gilbert, 1962] GILBERT E.N. (1962). *Random subdivision of space into crystals*. Ann. Math. Stat., vol. 33.
- [Hauk, 1997] HAUK V. (1997). *Structural and residual stress analysis by nondestructive methods*. Elsevier Science B.V., Amsterdam.
- [Hoc et Forest, 2001] HOC T. ET FOREST S. (2001). *Polycrystal modelling of IF-Ti steel under complex loading path*. Int. J. Plasticity, vol. 17, pp 65–85.
- [Lipinski, 1992] LIPINSKI P. (1992). *Modélisation du comportement des métaux en transformations élasto-plastiques finies çapartir des méthodes de transition d'échelles*. Thèse de Doctorat, Université de Metz.
- [Lu, 1996] LU J. (1996). *Handbook of measurement of residual stresses*. chapitre : X-Ray diffraction method (by M. Francois, J.M. Sprauel et al.). Fairmont Press.
- [Oliver et al., 2004] OLIVER E.C., DAYMOND M.R., ET WITHERS P.J. (2004). *Interphase and intergranular stress generation in carbon steels*. Acta Mater., vol. 52, pp 1937–1951.
- [Ortner, 1986] ORTNER B. (1986). *Advances in X-Ray analysis vol.29*. Ch. S. Barret et al. Editions, New-York.
- [Pesci, 2004] PESCI R. (2004). *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- [Randle et al., 1988] RANDLE V., RALPH B., ET DINGLEY D. (1988). *The relationship between microtexture and grain boundary parameters*. Acta Metall., vol. 36, pp 267–273.
- [Ravy, 2005] RAVY S. (2005). *Structure de la matière condensée - Cours de Master M2 Université Paris-Sud*. chapitre : 2, disponible sur [http ://www.lps.u-psud.fr/Utilisateurs/ravy/](http://www.lps.u-psud.fr/Utilisateurs/ravy/), pp 85–127.
- [Renevey, 1998] RENEVEY S. (1998). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay - CEA.

[Tanguy, 2001] TANGUY B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris.

[Tomota et al., 2003] TOMOTA Y., LUKÁS P., NEOV D., ARJO S., ET ABE Y.R (2003). *In situ neutron diffraction during tensile deformation of a ferrite-cementite steel*. Acta Mater., vol. 51, pp 805–817.

ANALYSE ET MODÉLISATION MICROMÉCANIQUE DU COMPORTEMENT ET DE LA RUPTURE FRAGILE DE L'ACIER 16MND5 : PRISE EN COMPTE DES HÉTÉROGÉNÉITÉS MICROSTRUCTURALES

Résumé : La cuve des réacteurs à eau sous pression forme la seconde barrière de confinement de l'assemblage combustible nucléaire. Dans les centrales françaises, elle est constituée d'acier 16MND5 faiblement allié (équivalent de la nuance ASTM A508 Cl.3). Diverses techniques expérimentales (microscopie électronique, diffraction des rayons X etc.) sont mises en oeuvre lors d'essais de tractions in-situ afin de mettre en évidence les hétérogénéités mécaniques apparaissant au sein du matériau. Ces mesures se font en cours de sollicitation pour diverses basses températures [-150°C ; -60°C]. Les hétérogénéités mécaniques sont principalement dues aux deux aspects « polycristallins » et « composite » (effet des amas de cémentite) de la microstructure. Des écarts de contraintes résiduelles interphases (jusqu'à 150 MPa en moyenne entre bainite et ferrite), et intraphases (jusqu'à 100 MPa en moyenne par orientation pour la ferrite) sont mis en évidence. Une modélisation complexe est mise en oeuvre afin de représenter le comportement. Elle inclut une loi micromécanique, un modèle de transition d'échelle, et une représentation par éléments finis d'agrégats 3D, le tout associé dans une démarche multi-échelles. L'identification se fait sur le comportement à différentes températures, et permet de reproduire les hétérogénéités de contraintes mises en évidence expérimentalement. Cette modélisation sert de base à l'application déterministe d'un critère local de rupture fragile micromécanique et cristallographique. L'utilisation de divers tirages de répartitions de carbures réalistes permet d'obtenir une probabilité de rupture du volume élémentaire en accord avec les hypothèses formulées par l'approche locale de la rupture. A ceci près que contrairement aux approches habituelles, on ne suppose pas de dépendance de cette probabilité par rapport au chargement ou à la microstructure, celle-ci est naturellement introduite.

Mots-clés : acier faiblement allié, microstructure, electron back scattering diffraction, microscopie, diffraction des rayons X, comportement, modélisation micromécanique, modèles de transition d'échelles, calcul de microstructure, approche locale de la rupture, clivage

MICROMECHANICAL ANALYSIS AND MODELLING OF THE BEHAVIOR AND BRITTLE FRACTURE OF A FRENCH 16MND5 STEEL : ROLE OF MICROSTRUCTURAL HETEROGENEITIES

Abstract : Reactor Pressure Vessel is the second containment barrier between nuclear fuel and the environment. Electricité de France's reactors are made with french 16MND5 low-alloyed steel (equ. ASTM A508 Cl.3). Various experimental techniques (scanning electron microscopy, X-ray diffraction ...) are set up in order to characterize mechanical heterogeneities inside material microstructure during tensile testing at different low temperatures [-150°C ; -60°C]. Heterogeneities can be seen as the effect of both "polycrystalline" and "composite" microstructural features. Interphase (until 150 MPa in average between ferritic and bainitic macroscopic stress state) and intraphase (until 100 MPa in average between ferritic orientations) stress variations are highlighted. Modelling involves micromechanical description of plastic glide, mean fields models and realistic three-dimensional aggregates, all put together inside a multi-scale approach. Calibration is done on macroscopic stress-strain curves at different low temperatures, and modelling reproduces experimental stress heterogeneities. This modelling allows to apply a local micromechanical fracture criterion for crystallographic cleavage. Deterministic computations of time to fracture for different carbides random selection provide a way to express probability of fracture for the elementary volume. Results are in good agreement with hypothesis made by local approach to fracture. Hence, the main difference is that no dependence to loading nor microstructure features is supposed for probability of fracture on the representative volume : this dependence is naturally introduced by modelling.

Keywords : low alloyed steel, microstructure, electron back scattering diffraction, microscopy, X-ray diffraction, behavior, micromechanical modelling, mean field model, 3D aggregates, local approach to fracture, cleavage