



HAL
open science

Simulation de la réponse mécanique d'un acier inoxydable austénitique à l'aide de calculs cristallins

Nicolas Rupin, Jean-Michel Proix, Félix Latourte, Ghiath Monnet

► To cite this version:

Nicolas Rupin, Jean-Michel Proix, Félix Latourte, Ghiath Monnet. Simulation de la réponse mécanique d'un acier inoxydable austénitique à l'aide de calculs cristallins. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. pp.Clé USB. hal-00592747

HAL Id: hal-00592747

<https://hal.science/hal-00592747>

Submitted on 3 May 2011

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.

Simulation de la réponse mécanique d'un acier inoxydable austénitique à l'aide de calculs cristallins

N. Rupin¹, J.M. Proix², F. Latourte¹, G. Monnet¹

¹ MMC, EDF R&D, France, {nicolas.rupin, felix.latourte, ghiath.monnet}@edf.fr

² AMA, EDF R&D, France, jean-michel.proix@edf.fr

Résumé — Ce travail s'intéresse au calcul multi-échelle cristallin par éléments finis. Il s'agit dans un premier temps de comprendre l'intérêt d'une telle démarche et les difficultés spécifiques qui apparaissent lors de sa mise en œuvre. Dans la suite, l'accent sera mis sur la forme de la loi de comportement à utiliser et la méthode d'intégration choisie dans le cadre d'une approche par éléments finis. L'objectif de pouvoir utiliser ce type de loi sur un problème comportant un grand nombre de degrés de liberté nécessite de traiter avec soin son implémentation numérique. Enfin, quelques confrontations qualitatives entre la formulation utilisée et des données expérimentales seront proposées.

Mots clés — calculs cristallins, loi de comportement, multi-échelle, rotation de réseau, acier inoxydable.

1 Contexte

Les composants de réacteurs nucléaires à eau sous pression (REP) sont soumis à des conditions de fonctionnement sévères, l'exploitant doit donc disposer de lois de comportement suffisamment fines pour permettre de justifier à tout moment l'intégrité de son matériel. En particulier, l'évolution microstructurale au cours de la vie de la centrale pourrait être intégrée dans les lois utilisées afin de prendre en compte ces phénomènes physiques lors des calculs. Cette évidence a conduit EDF à s'intéresser aux approches multi-échelles permettant d'intégrer les effets du vieillissement des matériaux, sous l'action de sollicitations thermomécaniques, chimiques et neutroniques. Avant de pouvoir mettre en œuvre une telle approche, il est nécessaire de s'intéresser à la simulation de la réponse mécanique de polycristaux associés à l'échelle fine du matériau. Dans le cadre de cette étude, un matériau classique très utilisé dans les composants internes de la cuve des REP sera considéré, il s'agit d'un acier inoxydable austénitique présentant une structure cristalline cubique à faces centrées (CFC). Nous présenterons tout d'abord la démarche multi-échelle proposée, puis nous détaillerons la loi de milieu continu utilisée et la technique d'implémentation retenue enfin, nous discuterons de l'utilisation de ce modèle dans le cas de traction simple sur un monocristal.

2 Modélisation à base physique

L'évolution du comportement mécanique d'un matériau polycristallin soumis à des sollicitations thermomécaniques complexes en présence d'un environnement chimique et neutronique agressif est délicat et ne peut être envisagée uniquement à l'échelle du milieu continu. De nombreux efforts ont été fournis, ces dernières décennies, afin de proposer des modélisations physiques susceptibles de décrire la complexité d'un matériau industriel et de prévoir son évolution. La physique de la plasticité, constituant le cœur du problème, peut maintenant être appréhendée au travers de simulations de dynamique des dislocations discrètes (DDD) [1] mettant en jeu le mouvement des défauts linéaires dans un cristal. La microstructure du cristal (population de dislocations, présence de précipités, de défauts d'irradiation...), donnée d'entrée pour de telles simulations, dépend quant à elle de la composition, de l'histoire thermomécanique, des interactions chimiques, du bombardement neutronique reçu par l'échantillon... L'intérêt des démarches micromécaniques basées sur la physique apparaît alors clairement : si des modèles sont disponibles pour décrire l'influence des sollicitations extérieures sur la microstructure étudiée, et si l'interaction entre dislocations et microstructure est également caractérisée, alors des lois de comportement

“à bases physiques” peuvent être construites. De telles formulations permettent de limiter le nombre de paramètres ajustables à l’échelle du calcul de structure (certains paramètres ne sauraient être identifiés à cette échelle), de simplifier le dialogue entre simulations et mesures expérimentales (de densités de dislocations par exemple), de clarifier l’influence de chaque paramètre physique et ainsi d’estimer l’influence d’une évolution de ce paramètre sur la réponse macroscopique du matériau.

La compréhension de la physique permet également de discriminer les paramètres relatifs à la structure cristalline (paramètres essentiellement géométriques), de ceux liés à la composition de l’alliage précisément étudié. Il est ainsi possible de caractériser l’interaction entre dislocations pour un matériau CFC. Ces interactions dépendent de la nature des dislocations (direction et vecteur de Burgers), et peuvent être purement élastiques ou consister en des jonctions dont les caractéristiques peuvent être données par des simulations aux échelles inférieures (ab initio, dynamique moléculaire). Un grand nombre de simulations (DDD) ont permis d’évaluer avec précision le nombre d’occurrences de telles situations et ainsi d’en déduire une contribution moyenne à l’échelle du cristal. Contrairement à ces phénomènes, d’autres tels que la friction du réseau qui s’oppose au mouvement d’une dislocation ou la densité initiale de dislocations, sont fortement dépendants des éléments d’alliage et du mode d’élaboration et nécessitent donc un traitement spécifique. Dans le cas présent, certaines estimations ont été obtenues par observation sur un acier austénitique [2] et ne sont pas transposables simplement à d’autres matériaux CFC.

La connaissance et l’évaluation des mécanismes précédemment décrits [2, 3, 4] a permis de formuler des lois de comportement basées sur la physique et qui peuvent être utilisées dans des simulations de milieux continus par éléments finis.

3 Formulation et implémentation numérique du modèle

Les difficultés liées à la formulation d’une loi de comportement cristalline suffisamment riche pour prendre en compte une évolution de la microstructure intracristalline ont été présentées. La modélisation physique retenue va maintenant être proposée, le but étant l’implémentation numérique et l’évaluation du modèle, nous tâcherons de décrire les équations sous la forme utilisée dans le code de calcul par éléments finis Code_Aster [6].

3.1 Equations constitutives

L’écoulement viscoplastique pour chaque système de glissement s du cristal, caractérisé par une normale \mathbf{n}_s au plan de glissement ($\{111\}$ pour les CFC) et une direction de glissement \mathbf{m}_s ($\langle 110 \rangle$ pour les CFC), est régi par l’équation (1a), liant la cission résolue τ_s (1b) à la vitesse de glissement $\dot{\gamma}_s$.

$$\dot{\gamma}_s = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau_s|}{\tau_f + \tau_s^{\text{forest}}} \right)^n \text{sgn}(\tau_s) \quad \text{avec} \quad \text{sgn}(x) = \frac{x}{|x|} \quad (1a)$$

$$\tau_s = \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\mu}_s \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{\mu}_s = \frac{1}{2} (\mathbf{m}_s \otimes \mathbf{n}_s + \mathbf{n}_s \otimes \mathbf{m}_s) \quad (1b)$$

Les paramètres τ_f , τ_s^{forest} décrivent une résistance au mouvement des dislocations du système s : le premier, lié à la friction sur le réseau (forces de Peierls) reste constant au cours de la déformation et le second décrit un écrouissage. Les paramètres n , $\dot{\gamma}_0$ constituent une régularisation de la plasticité parfaite vers laquelle le modèle tend si on choisit une valeur élevée pour l’exposant n . Du point de vue numérique, il s’avère plus efficace de substituer à (1a) une loi à seuil, pour éviter de tenir compte des glissements faibles lorsque le rapport des cissions est inférieur à l’unité. L’expression devient alors :

$$\dot{\gamma}_s = \begin{cases} 0 & \text{si } |\tau_s| \leq (\tau_f + \tau_s^{\text{forest}}) \\ \dot{\rho}_s \text{sgn}(\tau_s) & \text{sinon} \end{cases} \quad \text{avec} \quad \dot{\rho}_s = \dot{\gamma}_0 \left(\left(\frac{|\tau_s|}{\tau_f + \tau_s^{\text{forest}}} \right)^n - 1 \right) \quad (2)$$

L’écrouissage du matériau est décrit par l’évolution de la densité de dislocation ρ (représenté dans le code par un champ de variable interne) sur chaque système (3a) (voir également [5]), c’est l’évolution de cette variable interne qui influe sur l’évolution de la cission critique τ_s^{forest} comme le montre l’équation

(3b).

$$\dot{\rho}_s = \frac{1}{b} \left(A \frac{\sum_{j \in \text{forest}(s)} \sqrt{a_{sj}^{\text{eff}}} \rho_j}{\sum_{j=1,12} \sqrt{a_{sj}^{\text{eff}}} \rho_j} + B \sum_{j \in \text{copla}(s)} \sqrt{a_{sj}^{\text{eff}}} \rho_j - \gamma \rho_s \right) |\dot{\gamma}_s| \quad (3a)$$

$$\tau_s^{\text{forest}} = \mu b \sqrt{\sum_j a_{sj}^{\text{eff}}} \rho_j \quad (3b)$$

L'interaction entre systèmes de glissement (4) est modélisée par une matrice a_{ij} dont les paramètres sont identifiés à partir de calculs DDD et de simulations aux basses échelles (cinq interactions spécifiques ont été recensées [4]).

$$a_{sj}^{\text{eff}} = \left(0.2 + 0.8 \frac{\ln(\alpha b \sqrt{\rho})}{\ln(\alpha b \sqrt{\rho_{\text{ref}}})} \right)^2 a_{sj} \quad \text{avec} \quad \rho = \sum_i \rho_i \quad (4)$$

Tous les autres paramètres apparaissant dans les équations précédentes sont des constantes liées au matériau. L'équation (1b) constitue une équation de localisation, reliant la contrainte macroscopique à la cission résolue sur le système de glissement considéré. Une autre relation de changement d'échelle doit être utilisée pour fermer le système : dans l'hypothèse des petites perturbations, le taux de déformation viscoplastique macroscopique se déduit des taux de glissements plastiques par l'équation (5).

$$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = \sum_j \frac{\dot{\gamma}_j}{2} (\mathbf{m}_s \otimes \mathbf{n}_s + \mathbf{n}_s \otimes \mathbf{m}_s) = \sum_j \dot{\gamma}_j \boldsymbol{\mu}_s \quad (5)$$

et les déformations élastique ($\boldsymbol{\epsilon}^e$) et viscoplastique ($\boldsymbol{\epsilon}^p$) sont simplement reliées par une loi additive, ce qui conduit naturellement à une relation contrainte déformation élastique de la forme :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} : (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\epsilon}^p) \quad (6)$$

où $\boldsymbol{\epsilon}$ est la déformation totale et \mathbf{D} est l'opérateur d'élasticité, éventuellement anisotrope.

3.2 Intégration numérique

La loi de comportement a été mis en oeuvre dans Code_Aster [6] avec deux schémas d'intégration classique : un schéma explicite de Runge-Kutta d'ordre deux emboîté, avec contrôle d'erreur et subdivision du pas de temps, et un schéma purement implicite, avec une méthode de résolution de Newton pouvant être accompagnée d'une recherche linéaire. Pour améliorer la robustesse de la résolution, les équations (3a), (3b), (4) ont été adimensionnées, en remplaçant la densité de dislocations ρ_s par $\zeta = b^2 \rho_s$, ce qui conduit à :

$$\dot{\zeta}_s = \dot{\rho}_s h_s(\zeta_j) \quad \text{avec} \quad h_s(\zeta_j) = A \frac{\sum_{j \in \text{forest}(s)} \sqrt{a_{sj}} \zeta_j}{\sum_{j=1,12} \sqrt{a_{sj}} \zeta_j} + BC(\zeta) \sum_{j \in \text{copla}(s)} \sqrt{a_{sj}} \zeta_j - \frac{\gamma}{b} \zeta_s \quad (7)$$

$$\tau_s^{\text{forest}} = \mu C(\zeta) \sqrt{\sum_j a_{sj} \zeta_j} \quad \text{avec} \quad C(\zeta) = 0.2 + 0.8 \frac{\ln(\alpha \sqrt{\zeta})}{\ln(\alpha \sqrt{\zeta_{\text{ref}}})} \quad (8)$$

Pour effectuer l'intégration explicite, il suffit de fournir le système composé des équations différentielles (7), (8), (2), (1b) définies sur chacun des douzes systèmes de glissement, ainsi que les équations globales (5) et (6). Cette méthode est simple à mettre en oeuvre, utile pour les tests sur point matériel, mais peu performante pour calculs plus volumineux : on doit résoudre à chaque instant, pour chaque itération du schéma global de Newton et en chaque point de Gauss un système différentiel d'ordre 30, avec de nombreux redécoupages internes si on souhaite obtenir une précision raisonnable. C'est pourquoi il est utile de disposer d'une méthode d'intégration implicite.

3.3 Intégration implicite

Dans un schéma de Newton, il est essentiel d'optimiser la taille du système à résoudre afin de gagner en efficacité. Le problème à résoudre consiste donc à trouver, connaissant les contraintes $\boldsymbol{\sigma}^-$, les variables internes $\boldsymbol{\zeta}^-$, p^- , $\boldsymbol{\gamma}^-$ à l'incrément temporel précédent noté t^- , les inconnues principales : $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^- + \Delta\boldsymbol{\sigma}$ (de dimension six en 3D) et $\boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\zeta}^- + \Delta\boldsymbol{\zeta}$ (de dimension douze pour le cristal CFC) vérifiant :

$$R_i^{(1)}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\zeta}) = (D^{-1}\boldsymbol{\sigma})_i - ((D^-)^{-1}\boldsymbol{\sigma}^-)_i - \Delta\varepsilon_i + \sum_{s=1}^{12} \Delta p_s(\boldsymbol{\tau}_s, \boldsymbol{\zeta}) \text{sgn}(\boldsymbol{\tau}_s) \boldsymbol{\mu}_s \quad (6 \text{ équations}) \quad (9a)$$

$$R_s^{(2)}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\zeta}) = \Delta\zeta_s - \Delta p_s h_s(\boldsymbol{\zeta}) \quad (12 \text{ équations}) \quad (9b)$$

Code_Aster propose un environnement fournissant une méthode de Newton avec recherche linéaire pour en améliorer la robustesse et l'efficacité, ainsi qu'un calcul automatique de l'opérateur tangent à partir de la matrice jacobienne (voir [6]). Cette matrice jacobienne étant essentielle pour obtenir une bonne convergence, elle peut être validée par rapport à une matrice obtenue par perturbation. Une fois la solution obtenue (le processus de Newton ayant convergé), les autres inconnues s'en déduisent et sont simplement stockées après la résolution comme variables internes.

3.4 Traitement simple des rotations cristallines

Le formalisme considéré ici est celui des petites transformations, ce qui n'est acceptable que pour le début de la déformation d'un monocristal. L'idée de ce traitement est de permettre d'intégrer l'évolution de l'orientation des systèmes de glissement au cours de la déformation, et ce afin de reproduire les "stades", caractéristiques d'une courbes de traction monocristalline, liés à l'activation de systèmes secondaires.

Pour ce faire, le gradient des vitesses est considéré comme la somme d'une contribution liée au glissement plastique et d'une autre liée à un mouvement d'ensemble (corps rigide) et à élasticité du matériau. La partie anti-symétrique de ce tenseur ($\boldsymbol{\Omega}$ sous forme matricielle et $\boldsymbol{\omega}$ sous forme vectorielle) décrit la rotation instantanée du matériau, néanmoins la partie plastique ne fait pas évoluer les vecteurs \boldsymbol{n} et \boldsymbol{m} , ce terme est donc soustrait de la rotation totale [1, 7]. L'évolution des deux vecteurs est ensuite réalisée en incrémentant une matrice de rotation $\boldsymbol{Q}(t + dt) = \Delta\boldsymbol{Q} \cdot \boldsymbol{Q}(t)$ définie à partir de la formule de Rodrigues (10).

$$\Delta\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I} + \sin(\Delta\theta) \boldsymbol{n} \times + [1 - \cos(\Delta\theta)] (\boldsymbol{n} \times)^2 \quad (10)$$

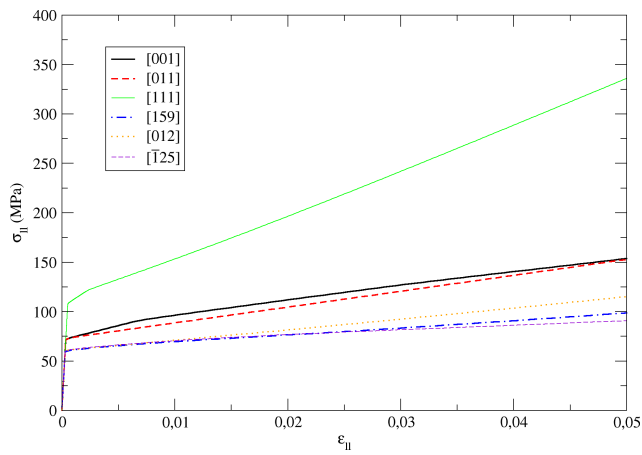
$$\text{avec} \quad \dot{\theta} = \|\boldsymbol{\omega}^{\text{rig.} + \text{el.}}\| \quad \Delta\theta = \dot{\theta} \Delta t \quad \boldsymbol{n} \times = \frac{\boldsymbol{\Omega}^{\text{rig.} + \text{el.}}}{\dot{\theta}}$$

4 Calculs monocristallins

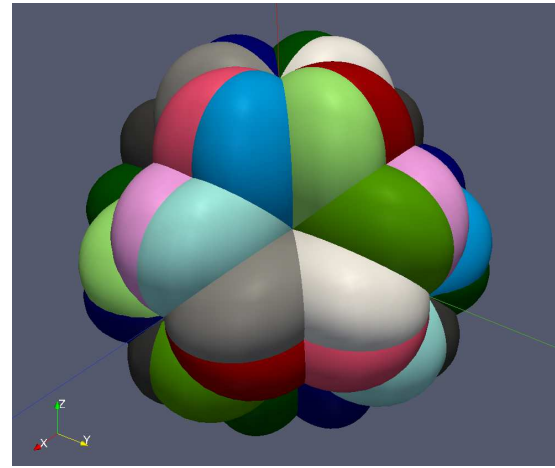
La loi cristalline ayant été définie, il s'agit maintenant de valider son implémentation et de voir si celle-ci est satisfaisante pour représenter le comportement d'un monocristal d'acier austénitique. Pour ce faire, des calculs sur point matériel (c'est à dire sans maillage) sont tout d'abord proposés. Ce type de géométrie est particulièrement intéressant car il est très simple de solliciter un point matériel suivant différentes directions, le problème sur un maillage fini est, quant à lui, plus délicat à modéliser. Un chargement de type traction simple ($\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{ll} \boldsymbol{l} \otimes \boldsymbol{l}$ où \boldsymbol{l} est la direction de traction) est utilisé.

Dans le cadre de cette présentation, seules certaines directions de sollicitations caractéristiques sont étudiées ($\boldsymbol{l} \in \{[100], [111], [159], [\bar{1}25]\}$). La courbe de traction σ_{ll} en fonction de $\varepsilon_{ll} = \boldsymbol{\varepsilon} : (\boldsymbol{l} \otimes \boldsymbol{l})$ est présentée figure 1(a). L'activité de chaque famille de système est représenté figure 2. Ces résultats sont en cohérence avec les facteurs de Schmid associés à ces orientations (figure 1(b)) :

- pour la direction de traction [001] huit facteurs non nuls égaux à 0,41.
- pour [111] six facteurs non nuls égaux à 0,27, ce qui est la seule configuration, pour un matériau CFC, où pour aucun système le facteur de Schmid ne dépasse cette valeur.
- pour [159] tous les facteurs sont non nuls et 0,5 est atteint (sur un seul système) ce qui est le maximum pour la structure CFC.
- pour $[\bar{1}25]$ tous les facteurs sont non nuls et un maximum unique à 0,49 est atteint.

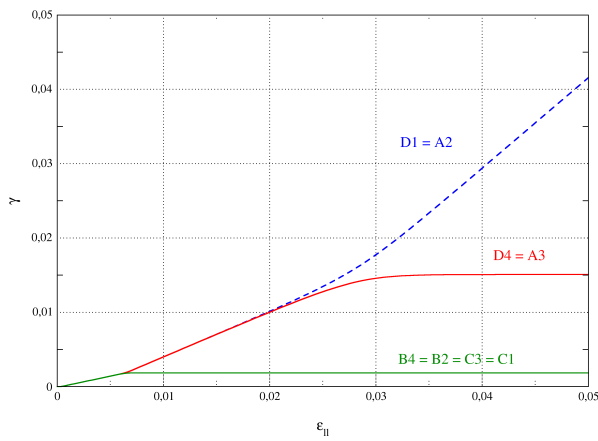


(a) Courbe contrainte déformation pour différentes directions de traction et des densités de dislocation initiales identiques.

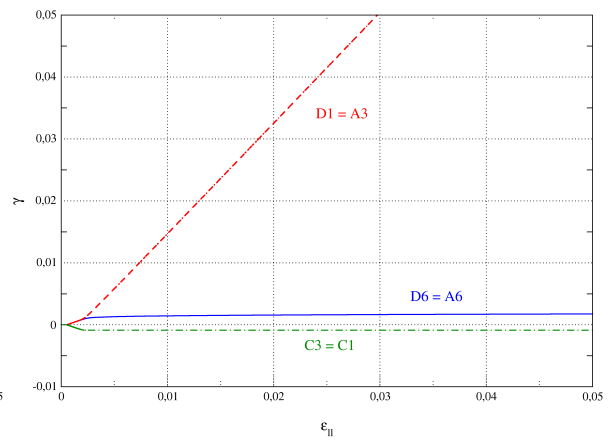


(b) Représentation tridimensionnelle des facteurs de Schmid (chaque couleur correspond à un système différent).

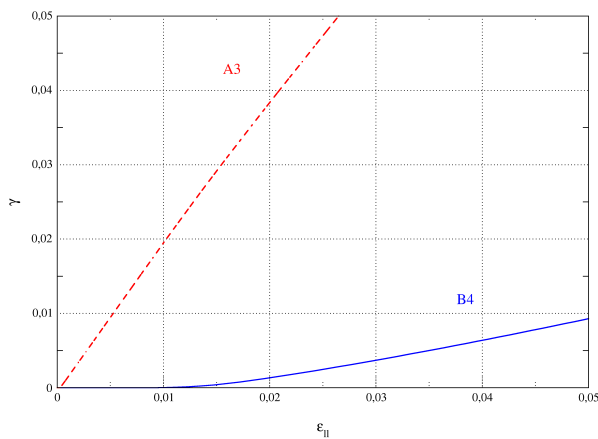
FIGURE 1 – Représentations du comportement axial de monocristaux.



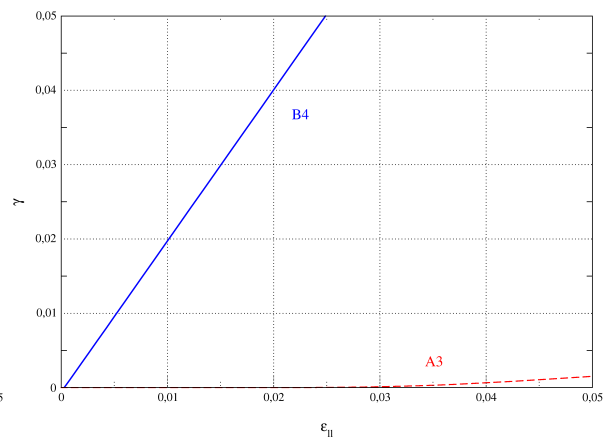
(a) Traction suivant [001]



(b) Traction suivant [111]



(c) Traction suivant [159]



(d) Traction suivant [125]

FIGURE 2 – Intensité du glissement sur chaque famille de système pour une traction simple. La désignation des systèmes est liée à la convention de Schmid et Boas [8] où les plans de glissement sont désignés par des lettres et les directions de glissement par des chiffres.

Les calculs obtenus pour les directions [100] et [111] sont réalisés pour des directions particulières ou plusieurs systèmes présentent des facteurs de Schmid identiques (ce qui est quasiment impossible expérimentalement) et pour des densités de dislocation rigoureusement égales sur tous les systèmes. Ces deux facteurs permettent une coexistence artificielle de plusieurs systèmes. Nous nous intéressons donc à l'effet induit par une perturbation sur les densités de dislocations initiales dans le cristal pour une orientation [111] (figure 3). Ces résultats montrent l'instabilité de l'orientation [111] liée à une perturbation faible

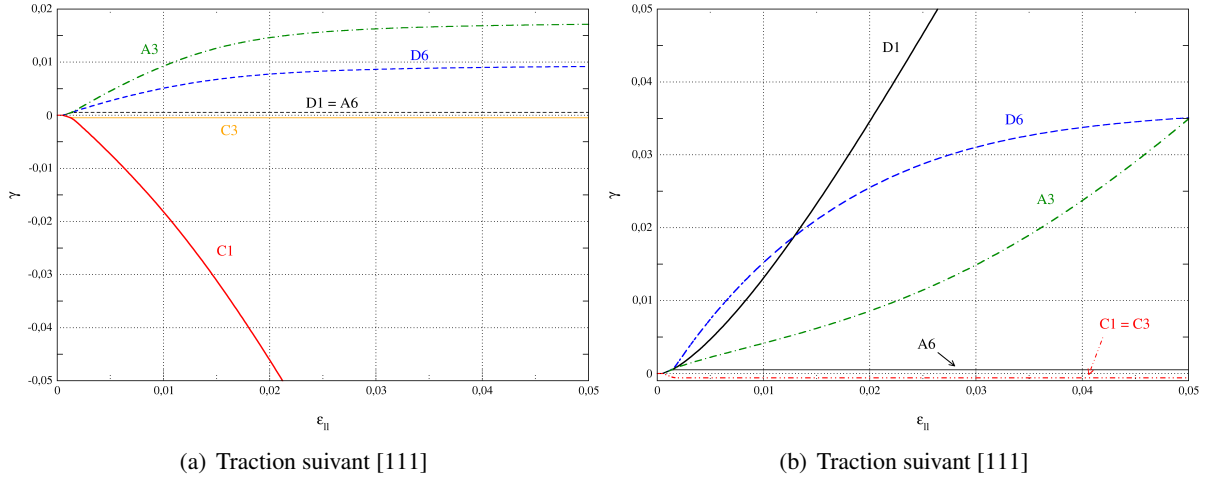


FIGURE 3 – Intensité du glissement sur chaque famille de système pour une traction simple avec deux jeux de perturbations des densités de dislocation initiales d'amplitude 0,1%.

des densités de dislocations initiales qui peut conduire à une distribution du glissement sur les systèmes très variable. C'est la perturbation qui "décide" du système prédominant par rapport aux six systèmes initialement équivalents.

Quelques commentaires supplémentaires peuvent être fait à partir de ces observations. Tout d'abord, il est remarquable que, même dans le cas où les densités de dislocations sont égales sur tous les systèmes, seuls certains contribuent à la déformation. L'activité des systèmes est alors liée à la matrice d'interaction utilisée dans la loi et obtenue par la DDD.

En particulier, les interactions de type "colinéaires" bloquent le développement de systèmes de même numéro, ce qui est cohérent avec la figure 2(b), où D1 et A3 se développent en limitant C1 et C3.

De même, l'apparition du glissement secondaire sur les figures 2(c) et 2(d) suit l'ordre des facteurs de Schmid (pour la direction [159] : le système primaire est A3 et le secondaire B4 avec un facteur de 0,46 ; pour la direction $\bar{1}25$: le système primaire est B4 et le secondaire A3 avec un facteur de 0,44) cette coexistence est facilité par l'interaction de type "Hirth" entre ces systèmes qui présentent le facteur d'interaction le plus faible. Une telle interprétation n'est possible qu'à l'aide d'un modèle intégrant explicitement une description physique de la plasticité cristalline.

Bien que pour ce mode de sollicitation la matrice d'interaction détermine l'extinction des systèmes et l'apparition de systèmes supplémentaires, dans le cas d'une traction monocristalline d'autres effets interviennent. La rotation cristalline induit par exemple le stade 2 de la déformation des monocristaux [9]. La modélisation d'un tel phénomène nécessite de simuler un essai de traction réaliste, celui-ci pourra par exemple être comparé à un essai de glissement simple afin de valider la prise en compte de la rotation des axes cristallographiques.

L'application de conditions de traction suivant une direction donnée (par exemple $\bar{1}25$) afin de n'activer qu'un seul système) sur un maillage fixe dans le repère de l'essai nécessite de faire tourner les axes du cristal, pour ce faire, le triplet d'angle d'Euler (convention de Bunge) suivant sera utilisé :

$$\varphi_1 = 0, \quad \phi = \arccos\left(\frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}\right), \quad \varphi_2 = \arctan2\left(\frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2}}; \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}}\right) \quad (11)$$

La rotation amenant la direction de sollicitation [hkl] en coïncidence avec l'axe z du repère de chargement n'est pas unique et les expressions précédentes constituent la solution sous l'hypothèse où φ_1 est nul.

Le calcul en glissement simple conduit à un état de sollicitation mécanique homogène dans l'éprouvette, ce qui nous permet de valider l'implémentation faite en utilisant une solution de référence issue d'un calcul numérique simplifié. L'accord entre la déformée prévue et celle effectivement observée (figure 4(a)) est ainsi vérifié. Deux autres modes de sollicitation sont considérés, une traction simple autorisant la rotation des extrémités du barreau (figure 4(b)) et une traction simple avec encastrement des têtes de l'éprouvette (figure 4(c)). Le premier cas de chargement permet, tout comme l'essai de glissement simple, de valider les champs mécaniques obtenus et la prévision de la rotation plastique. Le second, quant à lui, décrit les gradients qui peuvent apparaître sur l'échantillon lorsque celui-ci est sollicité à l'aide d'une machine de traction conventionnelle. Il est à noter que pour une plus grande flexibilité ces chargements sont appliqués à l'aide d'une technique de raccord 3D-discret. Une comparaison quantitative de ces résultats avec des observations expérimentales est actuellement en cours.

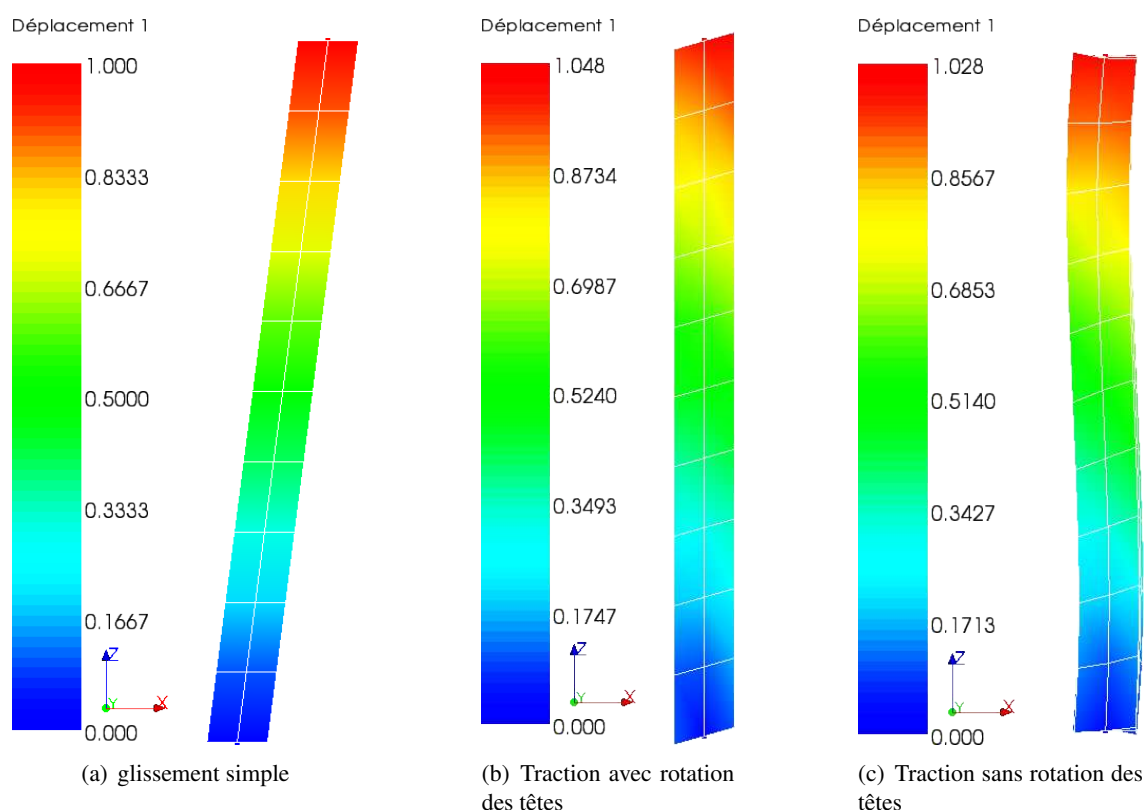


FIGURE 4 – Champ de déformation (norme) pour différentes conditions aux limites appliquées à un monocristal orienté suivant $[\bar{1}25]$.

5 Conclusion

Les travaux présentés ici constituent une étape de la démarche permettant de faire le lien entre la simulation physique aux échelles les plus fines (ab initio, dynamique moléculaire, DDD...) et le calcul de structure sur des composants industriels de grande taille (internes de cuve REP par exemple). Si la démarche semble maintenant bien définie des limitations existent encore en termes de mise en œuvre. En particulier, dans cette contribution, le choix a été fait de proposer une implémentation suivant au plus près les observations et modélisations physiques de la plasticité cristalline des aciers inoxydables austénitiques. Ainsi, par exemple, un exposant n très élevé a été choisi ce qui peut rendre les calculs particulièrement coûteux, une phase de simplification du modèle devra donc suivre afin d'améliorer l'équilibre entre description physique et performance numérique. De même, une prise en compte plus rigoureuse de la rotation cristalline et de l'évolution de l'anisotropie élastique (non considérée ici) nécessite de mettre en place une formulation de type grandes transformations ce qui est actuellement en développement dans le Code_Aster. Enfin, la prévision du comportement d'un polycristal nécessite de

clarifier l'effet des joints de grain sur le développement des populations de dislocations dans le matériau (afin modéliser par exemple l'effet Hall-Petch), des développements complémentaires sont à l'étude sur ces questions.

Références

- [1] M. Fivel, S. Forest. *Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du monocristal*, Techniques de l'ingénieur, M 4 016.
- [2] G. Monnet. *A crystalline plasticity law for austenitic stainless steel*, EDF R&D internal report, PERFORM Project, H-B60-2008-04690-EN, 1-18, 2009.
- [3] B. Devincere, L. Kubin, T. Hoc. *Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations*, Scr. Mater., elsevier, 741-746, 2006.
- [4] L. Kubin, B. Devincere, T. Hoc. *Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals*, Acta. Mater., elsevier, 6040-6049, 2008.
- [5] H. Mecking, U.F. Kocks. *Kinetics of flow and strain hardening*, Acta. Met., elsevier, 1865-1875, 1981.
- [6] J.M. Proix. *Comportements élastoviscoplastiques mono et polycristallins*, Documentation du Code_Aster R5.03.11 www.code-aster.org, 1-40, 2010.
- [7] M. Berveiller, A. Zaoui. *Modélisation de la déformation plastique des polycristaux*, Techniques de l'ingénieur, M 48, 1997.
- [8] E. Schmid, W. Boas. *Kristallplastizität*, Springer-Verlag, Berlin, 1935.
- [9] B. Jaoul. *Etude de la plasticité et application aux métaux*, Presse des Mines, 2008.