

Plasticité cristalline dans un acier bainitique revenu : simulations pour la validation de modèles à partir de mesures de champs

Félix Latourte, Nicolas Rupin, Jean-Michel Proix

▶ To cite this version:

Félix Latourte, Nicolas Rupin, Jean-Michel Proix. Plasticité cristalline dans un acier bainitique revenu: simulations pour la validation de modèles à partir de mesures de champs. 11e colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2013, Giens, France. hal-01717066

HAL Id: hal-01717066 https://hal.science/hal-01717066

Submitted on 25 Feb 2018

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.

Public Domain

Plasticité cristalline dans un acier bainitique revenu : simulations pour la validation de modèles à partir de mesures de champs

Félix LATOURTE¹, Nicolas RUPIN¹, Jean-Michel PROIX²

¹ EDF R&D, Dept. MMC, Les Renardières, felix.latourte@edf.fr
 ² EDF R&D, Dept. AMA, Clamart

Résumé — Dans le cadre du développement d'études multi-échelles sur le comportement des matériaux, ce travail porte sur la plasticité cristalline de l'acier 16MND5 utilisé pour la construction des cuves des réacteurs à eau pressurisée. Des mesures de champs in-situ sont réalisées au cours d'un essai dans un microscope à balayage afin de capturer les champs de déformation à l'échelle de la microstructure. Ces champs surfaciques expérimentaux sont ensuite comparés à ceux obtenus par des calculs d'homogénéisation d'une part, et par la méthode des éléments finis d'autre part. Différentes lois de plasticité cristalline sont considérées lors de comparaisons entre champs expérimentaux et simulés.

Mots clés — Plasticité cristalline, calcul d'agrégats, acier bainitique 16MND5, mesures de champs.

1 Introduction et motivation de l'étude

Les composants métalliques utilisés dans les réacteurs à eau pressurisée (REP) voient leur comportement évoluer au cours de leur fonctionnement. Ce viellissement peut être provoqué, par exemple, par des phénomènes thermiquement activés, des sollicitations cycliques, des évolutions liées à l'irradiation...Il induit des modifications de la microstructure des matériaux considérés, dont la morphologie et les constituants sont à l'origine du comportement mécanique. Afin d'établir des modèles prédictifs de ce comportement macroscopique, des méthodologies doivent être établies pour décrire le comportement à l'échelle de la microstructure qui est l'échelle pertinente pour tenir compte des évolutions du matériau. Des prédictions d'importance majeure pour l'exploitation des REP concernent, entre autres composants, la cuve [1, 2], les internes de cuve [3], les gaines de combustible [4, 5]. Les méthodologies considérées dans ces travaux se basent sur des approches multi-échelles et des progrès considérables ont pu être réalisés pour la modélisation du comportement de l'acier de cuve (16MND5) ou des internes (AISI 316L) grâce aux travaux réalisés dans le cadre du projet européen PERFORM60 [6]. La plasticité cristalline constitue un élément central de ces approches, qui, via des calculs réalisés sur des aggrégats polycristallins, ou des techniques d'homogénéisation, permet de faire le lien entre le comportement du monocristal et le comportement macroscopique du matériau. Il s'agit d'un lien particulièrement important car le comportement du monocristal peut être prédit par des simulations de dynamique des dislocations dans lesquelles peuvent être directement introduits des objets associés au vieillissement (boucles de dislocation, précipités, cavités) [7]. Cependant, les essais mécaniques sur le monocristal sont délicats à conduire pour des aciers austénitiques [8, 9] voire d'une extrême difficulté lorsque la taille des zones monocristallines est proche du micron ce qui est le cas des aciers bainitiques et martensitiques. De plus, le monocristal n'étant qu'un constituant élémentaire du matériau, son comportement doit être homogénéisé [10, 11] et les règles de transition d'échelle doivent être validées. Cette homogénéisation constitue en soi un domaine de recherche dans lequel s'inscrivent des études sur l'utilisation de méthodes de résolution alternatives aux éléments finis [12] ou sur les formulations avancées de la mécanique du continu [13]. Le lecteur intéressé par ces différents points et par leurs potentiels d'application pourra se référer à des travaux de revue bibliographique [14].

Dans ce contexte, le travail présenté dans cet article vise à améliorer la compréhension du comportement de l'acier de cuve à température ambiante et à l'échelle microstructurale. Il s'agit d'un problème délicat étant donné la complexité microstructurale de cet acier, ce qui rend sa modélisation micromécanique difficile. La validation de la modélisation du comportement de ce matériau par des données expérimentales aux échelles pertinentes nous intéresse dès lors particulièrement. Un essai de traction a été réalisé avec cet objectif et sera présenté en premier lieu. Les lois de comportement retenues dans ce travail seront ensuite exposées. Quelques résultats obtenus par des calculs en champ moyen montreront ensuite la nécessité de réaliser un calcul en champ complet. La méthodologie retenue pour réaliser ce type de calcul sera ensuite précisée, puis les champs expérimentaux et calculés seront présentés afin de conclure.

2 Essai de traction in-situ et mesure de champs pour un polycristal d'acier 16MND5

Un essai de traction *in-situ*, déjà présenté dans [15] a été réalisé à l'aide d'une micromachine de traction disposée dans la chambre d'un microscope éléctronique à balayage (FEI Quanta 600). Les dimensions de l'éprouvette considérée sont données sur la figure 1a. La zone étudiée par microscopie est située au centre de la partie utile de l'éprouvette et fait 150 µm de côté. Afin de caractériser les orientations cristallines locales de la microstructure, un polissage fin a été conduit permettant une acquisition EBSD (ou diffraction d'électrons rétrodiffusés). Ces orientations sont mises en évidence sur la microstructure de la figure 1b en utilisant une échelle de couleurs liée à une représentation par figure de pôle inverse. Les hétérogénéités cristalline sont mises en évidence par cette cartographie, révelant des discontinuités de plus ou moins forte désorientation (joints de grains, lattes), ainsi que des variations continues d'orientation à l'intérieur des grains.



Fig. 1 – Éprouvette utilisée pour l'essai in-situ cotée en millimètres indiquant la position de la zone étudiée en microscopie (a); Représentation par figure de pôle inverse de la microstructure étudiée (b), la barre d'échelle est de 50 μ m.

Les images acquises au cours de l'essai ont permis d'obtenir des champs cinématiques au moyen d'une méthode de corrélation d'images numériques (CIN) introduite dans [16]. Cette technique, maintenant répandue [17], se base sur la comparaison d'images présentant des variations de niveaux de gris locales associées à une texture de surface. Dans le cadre de cet essai, la texture a été obtenue par une attaque chimique révelant la précipitation dispersée de l'acier 16MND5. L'image de référence acquise avant application du chargement est présentée sur la figure 2a. À partir de la moyenne spatiale de chaque composante plane de déformation ($\langle \varepsilon_{xx} \rangle$, $\langle \varepsilon_{yy} \rangle$, $\langle \varepsilon_{xy} \rangle$), il est possible de tracer les courbes mésoscopiques contrainte-déformation issues de l'essai sur la figure 2b jusqu'à une déformation $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ de 10%. Cette même quantité atteint 78% en fin d'essai juste avant la rupture de l'éprouvette.

Du fait de l'entaille réalisée sur la partie utile de l'éprouvette, permettant de concentrer les déformations sur une zone d'étendue réduite, le chargement appliqué est légèrement biaxial. Pour un chargement uniaxial dans la direction *x*, du fait de la conservation de volume en plasticité, on obtiendrait $\langle \varepsilon_{yy} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \varepsilon_{xx} \rangle$. Ici, la déformation transverse $\langle \varepsilon_{yy} \rangle$ est supérieure à $-\frac{1}{2} \langle \varepsilon_{xx} \rangle$ par effet d'entaille : la contrainte moyenne $\langle \sigma_{yy} \rangle$ est positive. La déformation moyenne $\langle \varepsilon_{xy} \rangle$ est nulle ce qui est attendu car la zone d'étude est centrée par rapport au plan de symétrie longitudinal de l'éprouvette.

Deux points choisis comme étant caractéristiques du chargement sont représentés sur la figure 2b : un premier point correspondant à l'image 20 pour laquelle une déformation mésoscopique $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ de 2%



Fig. 2 – Image acquise en électrons secondaires au MEB (à gauche) montrant la vue normale (a) et un détail agrandi (b, avec une barre d'échelle de 10 μ m) et courbes mésoscopiques contrainte-déformation obtenues à partir des résultantes d'efforts et des champs de déformations mesurés par corrélation d'images numériques (à droite).

est atteinte, un deuxième point correspondant à l'image 30 pour laquelle une déformation $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ de 6% est atteinte.

3 Description des lois de comportement utilisées

Nous nous intéressons à deux lois de comportement de complexité différente : la loi de Méric-Cailletaud, inspirée de lois phénoménologiques macroscopiques, permet de prendre en compte différents systèmes de glissement et possède des composantes d'écrouissage cinématiques et isotropes qui permettent, après homogénéisation, d'obtenir un comportement cyclique réaliste. La deuxième loi utilisée dans ce travail, dite DD_CC, davantage basée sur la physique, introduit un nombre supérieur de paramètres, et a pour objectif d'améliorer la description et la compréhension des mécanismes actifs de la plasticité intragranulaire. Certains paramètres peuvent être directement corrélés à des paramètres microstructuraux ou métallurgiques, ou déduits de simulations de dynamique des dislocations, ce qui limite alors le nombre de paramètres à identifier pour obtenir un comportement macroscopique satisfaisant.

3.1 loi de Méric-Cailletaud

La première loi de comportement considérée est la loi de Méric-Cailletaud introduite dans [18]. Avec cette loi, nous considérons pour l'acier 16MND5 de structure cubique centrée 12 systèmes de glissement principaux de plans $\langle 110 \rangle$ et 12 systèmes de glissement secondaires de plans $\langle 112 \rangle$ [19]. Pour un système de glissement *s* de normale n_s et de direction m_s , le tenseur d'orientation μ_s s'écrit :

$$\boldsymbol{\mu}_{s} = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{n}_{s} \otimes \boldsymbol{m}_{s} + \boldsymbol{m}_{s} \otimes \boldsymbol{n}_{s} \right)$$
(1)

La cission résolue τ_s sur le système *s* s'écrit alors :

$$\tau_s = \boldsymbol{\mu}_s : \boldsymbol{\sigma} \tag{2}$$

Un chargement purement monotone étant considéré, nous simplifions le modèle introduit dans [18] en supprimant l'écrouissage cinématique et en conservant uniquement un écrouissage isotrope. La loi d'écoulement viscoplastique sur chaque système *s* prend alors la forme suivante :

$$\dot{\gamma}_s = \dot{p}_s \frac{\tau_s}{|\tau_s|} \tag{3}$$

$$\dot{p}_s = \left\langle \frac{|\tau_s| - R_s(p_s)}{K} \right\rangle_+^n \tag{4}$$

avec $\langle a \rangle_+ = \frac{1}{2} (|a|+a)$ la partie positive de *a*. L'écrouissage est isotrope non linéaire à saturation exponentielle et fait intervenir la matrice d'interaction entre systèmes de glissement h_{sr} :

$$R_{s}(p_{s}) = R_{0} + Q\left(\sum_{r=1}^{24} h_{sr}\left(1 - e^{-b \cdot p_{r}}\right)\right)$$
(5)

Nous considérons ici une matrice d'interaction pleine de telle sorte que $h_{sr} = h$, $\forall (s, r)$. Les paramètres de la loi de Méric-Cailletaud retenus sont issus de travaux antérieurs [2] pour lesquels l'identification est faite à partir des courbes de traction macroscopiques. Ils sont résumés dans la tableau 1 et l'accord entre la réponse macroscopique calculée par homogénéisation sur 30 grains et la courbe $\langle \sigma_{xx} \rangle - \langle \varepsilon_{xx} \rangle$ de l'essai in-situ a été vérifiée.

Tableau 1 - Paramètres utilisés pour la loi de Méric-Cailletaud

R_0 (MPa)	Q (MPa)	b (-)	K (MPa)	n (-)	h (-)
175	30	20	12	5	1

3.2 loi DD_CC

Tout comme la loi introduite par Kocks et Rauch [20], la loi DD_CC introduite par Monnet [21] vise a accroître le contenu physique de la loi cristalline en s'appuyant, par exemple, sur des résultats de calculs de dynamique de dislocations pour l'acier de cuve. Tandis que dans la loi de Méric-Cailletaud, les variables internes régissant la plasticité sont les glissements sur chaque système γ_s , les densités de dislocation ρ_s deviennent les variables internes principales de la loi DD_CC. Seuls les 12 systèmes $\langle 110 \rangle$ principaux sont considérés. Dans d'autres travaux, une loi similaire a été introduite pour les aciers austénitiques de structure cristalline cubique à face centrée [22].

A basse température, des calculs de dynamique de dislocations ont montré que l'écoulement est uniquement controlé par la cission effective τ_{eff}^s sur les segment vis des dislocations, indépendamment de la loi de mobilité utilisée pour le segment non-vis [23, 24]. Cet écoulement se produit alors par nucléation de doubles décrochements sur les segments vis. La loi d'écoulement régissant γ_{nuc} ("*nuc*" pour nucléation) s'écrit dans ce régime en fonction de la longeur moyenne des segments vis l^s , de la densité de dislocations mobiles ρ_m^s considérée constante, de la température T et de l'énergie d'activation ΔG :

$$\dot{\gamma}_{nuc}^{s} = \rho_{m}^{s} b H \cdot l^{s} \left(\rho, \tau_{eff}^{s} \right) \cdot exp \left(\frac{-\Delta G \left(\tau_{eff}^{s} \right)}{k_{B} T} \right) \frac{\tau_{s}}{|\tau_{s}|}$$
(6)

$$\Delta G\left(\tau_{eff}^{s}\right) = \Delta G_{0}\left(1 - \sqrt{\frac{\left\langle \tau_{eff}^{s} \right\rangle_{+}}{\tau_{0}}}\right)$$
(7)

(8)

avec b la norme du vecteur de Bürgers et H un paramètres d'activation. A haute température, le régime athermique est atteint, et l'équation 6 n'est plus valide. Une loi visqueuse de type Norton peut alors être utilisée, associée à un mécanisme de friction ou "drag" :

$$\dot{\gamma}_{drag}^{s} = \dot{\gamma}_{0} \left(\frac{|\tau^{s}|}{\tau_{c}^{s}}\right)^{n} \cdot \frac{\tau^{s}}{|\tau^{s}|} \tag{9}$$

La compétition entre les deux régimes est régulée par une moyenne harmonique permettant d'obtenir le glissement total γ^s :

$$\frac{1}{\dot{\gamma}^{s}} = \frac{1}{\dot{\gamma}^{s}_{nuc}} + \frac{1}{\dot{\gamma}^{s}_{drag}}$$
(10)

Intervenant dans l'équation 6, la longueur moyenne inter-obstacle *l* dépend de la matrice d'interaction dans le régime athermique a_{AT} , de la longeur critique d'une double paire l_c , et de l'espacement moyen entre obstacles λ :

$$(\lambda^{s} + D_{obs})^{-1} = min\left(\sqrt{\rho_{f}^{s}}; (D_{obs} + 2R^{s})\rho_{f}^{s}\right) \text{ avec } \rho_{f}^{s} = \sum_{j \neq s} \rho^{j}, R^{s} = \frac{\lambda^{s}}{2\alpha_{AT}^{s}}$$
(11)

$$\alpha_{AT}^{s} = \left(\sum_{j \neq s} a_{AT}^{sj} \frac{\rho^{j}}{\rho_{f}^{s}}\right)^{1/2}; \ l_{s} = max(\lambda_{s} - 2\alpha_{AT}^{s}R^{s}; l_{c}) \ \text{avec} \ l_{c} = 500b\left(T/T_{0}\right)$$
(12)

avec T_0 une température de référence égale à 300°K, et D_{obs} la taille moyenne d'obstacle. La prise en compte de défauts d'irradiation peut se faire directement en ajoutant une contribution à la densité de dislocation de forêt ρ_f^s . La cission effective τ_{eff} dépend de la cission appliquée τ_{app} et de la cission critique τ_c , elle-même fonction de la cission dûe aux interactions de longue portée τ_{LR} et de la cission dûe à la tension de ligne τ_{LT} :

$$\tau_{eff}^{s} = \left|\tau_{app}^{s}\right| - \tau_{c}^{s}, \text{ avec } \tau_{c}^{s} = \sqrt{\tau_{LR}^{s^{2}} + \tau_{LT}^{s^{2}}} + \tau_{F}$$
(13)

$$\tau_{LR}^{s} = \mu b \sqrt{a_{AT}^{ss} \rho^{s}}; \ \tau_{LT}^{s} = max \left[0; \ \alpha_{AT}^{s} \mu b \left(\frac{1}{\lambda^{s}} - \frac{1}{2\alpha_{AT}^{s} R^{s} + l_{c}} \right) \right]$$
(14)

L'évolution de la densité de dislocation résulte d'estimations du libre parcours moyen de dislocations et fait intervenir la taille de packet bainitique D_{lath} , et les paramètres de multiplication K_{self} et K_f :

$$\dot{\rho}^{s} = \left[\frac{1}{D_{lath}} + \frac{\sqrt{a^{ss}\rho^{s}}}{K_{self}} + \frac{\alpha^{s}\lambda^{s}\rho_{f}^{s}}{K_{f}} - y^{s}\rho^{s}\right]\frac{\dot{\gamma}^{s}}{b}$$
(15)

$$a^{sj} = a^{sj}_{AT} \left(1 - \frac{\tau^s_{eff}}{\tau_0} \right)^2; \quad \frac{1}{y^s} = \frac{1}{y_{AT}} + \frac{2\pi\tau^s_{eff}}{\mu b}$$
(16)

L'identification des paramètres de cette loi a été réalisée par G. Monnet et L. Vincent pour un acier bainitique Euromaterial A de constitution proche de l'acier de cuve et ces paramètres utilisés dans cette étude sont rapellés dans le tableau 2. La matrice d'interaction a_{AT}^{sj} est définie au moyen de deux paramètres, l'un $(a_{AT}^{sj})_{coli}$ pour les systèmes colinéaires d'interaction forte et l'autre $(a_{AT}^{sj})_{\neq coli}$ pour les systèmes non colinéaires d'interaction plus faible. Les principaux paramètres d'ajustement sont notés en gras dans le tableau 2.

<i>b</i> (nm)	$H(s^{-1})$	$\Delta G_0 (\mathrm{eV})$	τ_0 (MPa)	$\rho_m (mm^{-2})$	$\rho_{ini} (mm^{-2})$	$\dot{\gamma}_0 (s^{-1})$	n
0.248	$1 \cdot 10^{11}$	0.84	363	10 ⁶	$13 \cdot 10^{6}$	10^{-6}	50
D_{obs} (nm)	y_{AT} (nm)	τ_F (MPa)	D_{lath} (mm)	$(a_{AT}^{sj})_{coli}$	$(a_{AT}^{sj})_{ eq coli}$	K _{self} (MPa)	K_f (MPa)
10	2	35	0.01	0.7	0.1	70	23

Tableau 2 – Paramètres utilisés pour la loi DD_CC

4 Etudes préliminaires basées sur les champs de déformation expérimentaux

Pour définir une déformation équivalente à partir d'une mesure de déformation dont seules les composantes planes sont connues, nous choisissons de travailler avec un invariant du tenseur plan, soit $\varepsilon_{eq} = (\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + 2\varepsilon_{xy}^2)^{\frac{1}{2}}$. Le facteur de Schmid est souvent utilisé pour prédire le glissement sur un système donné. En tout point utilisé pour le calcul du champ de déformation expérimental, le facteur de Schmid a été calculé en considérant le chargement uniaxial $\sigma = \sigma(e_x \otimes e_x)$. Dans ce cas, pour un système de glissement *s* d'orientation μ_s , le facteur de Schmid f_s s'écrit :

$$f_s = (\boldsymbol{e_x} \otimes \boldsymbol{e_x}) : \boldsymbol{\mu}_s = (n_s \cdot \boldsymbol{e_x})(m_s \cdot \boldsymbol{e_x})$$
(17)



Fig. 3 – Déformation équivalente en fonction du facteur de Schmid pour une déformation macroscopique de 6% (à gauche) et distribution de taille de grains sur la surface observée expérimentalement (à droite).

Pour chaque point de calcul du champ de déformation associé à une déformation mésoscopique de 6%, la déformation ε_{eq} est tracée en fonction du facteur de Schmid maximal $\sup_s(f_s)$ sur la figure 3. Aucune corrélation n'apparait entre les deux quantités.

Le facteur de Schmid ne permettant pas d'expliquer seul la localisation des déformations, un calcul d'homogénéisation utilisant la règle de localisation de Berveiller-Zaoui (BZ) [10] a ensuite été réalisé pour la microstructure expérimentale (*cf.* figure 1b) de 651 grains dont la distribution de taille est donnée figure 3. Pour ce calcul, la loi utilisée est celle de Méric-Cailletaud rappelée en partie 3.1. Sur la figure 4,



Fig. 4 – Distribution de déformations ε_{xx} obtenues expérimentalement et par calcul BZ (à gauche) et diagramme de corrélation représentant les déformations des 50 grains de plus grande dimension (à droite)

les distributions de déformation longitudinale ε_{xx} obtenues car calcul d'homogénéisation et expérimentalement par CIN peuvent d'abord être comparées pour une même déformation mésoscopique $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ de 5%. L'écart type de la distribution de déformation calculée est beaucoup plus faible que celui de la déformation expérimentale. Ce calcul n'est donc pas capable de restituer l'amplitude des hétérogénéités de déformation sur cette microstructure. La distribution calculée serait certaineemnt plus réaliste avec une méthode d'homogénéisation plus avancée. D'autre part, il est possible de comparer grain-à-grain la déformation calculée et expérimentale. Cette comparaison est présentée pour les 50 grains de plus grande surface dont la distribution est donnée 3b. En première approximation, la déformation expérimentale considérée est alors celle mesurée au centre de gravité du grain, après que le caractère suffisament local de la mesure ait été vérifié. Aucune corrélation n'apparait sur cette figure.

5 Calcul par éléments finis sur une microstructure expérimentale

5.1 Réalisation de calculs aux éléments finis à partir d'une microstructure caractérisée expérimentalement

Pour réaliser le calcul en champ complet, le code de calcul par éléments finis Aster est utilisé dans sa version parallélisée [25]. Pour améliorer la rapidité du calcul, la taille du modèle a été limitée à

 $50 \times 50 \mu m^2$, ce qui correspond au pavé central de la microstructure présentée figure 1b subdivisée en 3x3 domaines. Nous noterons Ω ce domaine. A partir de données d'orientation locales issues de l'EBSD, un maillage régulier comportant 104x120 éléments hexagonaux linéaires est crée. Chaque élément se voit alors attribué une orientation issue de la cartographie EBSD. Cette stratégie présente l'inconvénient de décrire des joints de grains par des segments brisés à angle droit. En revanche, cette stratégie est parfaitement objective, simple à mettre en place et les gradients d'orientation intragranulaires sont naturellement pris en compte. Le maillage est présenté sur la figure 5 et l'on peut constater que la discrétisation étant fine par rapport à la taille moyenne de grains, la microstructure est représentée de façon fidèle et réaliste.



Fig. 5 – cartographie du premier angle d'euler en radians de la microstructure modélisée (à gauche) : le maillage est représenté par des arrêtes noires, les joints de grains représentés par des contours blancs ont été superposés. Au centre : représentation sous forme vectorielle amplifiée des conditions aux limites expérimentales appliquées au domaine Ω pour une déformation macroscopique de 6% (image 30). A droite : évolution des fluctuations de déplacement $u_x(y) - \langle u_x \rangle_{\partial \Omega_g}$ sur le bord gauche du domaine $\partial \Omega_g$ en fonction de l'indice d'image

Sur la figure 5 sont également représentées les conditions aux limites pour $\langle \epsilon_{xx} \rangle = 6\%$ appliquées au bord du domaine $\partial \Omega$. Le déplacement de chaque nœud de $\partial \Omega$ est interpolé à partir du champ obtenu par CIN. Les fluctuations du déplacement au contour montrent l'accroissement des hétérogénéités de déformation au cours du chargement, on peut constater la continuité de cette évolution au cours du chargement.

5.2 Calculs et résultats

Le calcul avec la loi de comportement de Méric-Cailletaud a pu être réalisé jusqu'à une déformation macroscopique de 2%. Le champ de déformation ε_{xx} issu du calcul est comparé avec celui obtenu expérimentalement sur la figure 6, pour une même déformation macroscopique. Les valeurs maximales des champs étant proches, ceux-ci ont été tracés avec la même barre d'échelle. On observe une corrélation satisfaisante entre la localisation de déformation prédite par le calcul est celle observée expérimentalement. Le calcul avec la loi de comportement DD_CC a été réalisé jusqu'à une déformation macroscopique de



Fig. 6 – Comparaison entre déformation ε_{xx} mesurée par CIN (à gauche) et déformation ε_{xx} calculée avec la loi de Méric-Cailletaud (à droite) pour une déformation macroscopique de 2%



Fig. 7 – Comparaison entre déformation ε_{xx} mesurée par CIN (à gauche) et déformation ε_{xx} calculée avec la loi DD_CC (à droite) pour une déformation macroscopique de 6%

6%. Le champ de déformation ε_{xx} issu du calcul est comparé avec celui obtenu expérimentalement sur la figure 7, pour une même déformation macroscopique. La barre d'échelle de chaque calcul a été ajustée indépendament car les déformations maximales obtenues avec calcul avec la loi DD_CC sont inférieures à celles observées expérimentalement. Les hétérogénéités du champ de déformation obtenues avec la loi DD_CC semblent moins marquées qu'avec la loi de Méric-Cailletaud.

En conclusion, les hétérogénéités de déformations calculées avec chacune des lois présentent une bonne corrélation avec celles obtenues expérimentalement, ce qui motive la poursuite de ces travaux. Des hétérogénéités du champ de déformation plus marquées sont observées avec la loi de Méric-Cailletaud qu'avec la loi DD_CC. Ceci pourrait être dû au fait que le nombre de systèmes considérés n'est pas identique pour ces deux lois, ou encore à des différences importantes sur la matrice d'interaction. Il est intéressant de noter que le comportement mécanique macroscopique résultant de l'homogénéisation de ces deux lois reste fidèle à la réponse du matériau, et que cette adéquation ne suffit pas à assurer la pertinence d'une loi de comportement cristalline ainsi que de ses paramètres. Au contraire, l'écart entre les champs calculés et obtenus expérimentalement, à l'échelle de la microstructure, peut s'avérer discriminants en ce qui concerne la modélisation de la plasticité cristalline. Étant donné le temps de calcul nécessaire pour réaliser un calcul unitaire, la mise en place de stratégie d'identification de paramètres par recalage éléments finis [26] semble peu réalisable pour des microstructures bainitiques ou martensitiques. Cependant, les deux types de calculs présentés dans ce travail présentent des réponses différentes et la poursuite de quelques calculs associés à des variations de paramètres bien choisies permettraient de faire des avancées considérables sur la modélisation de la plasticité cristalline sur ce type de matériau. Enfin, des essais *in-situ* réalisés à plus basse température permettraient de limiter le nombre de mécanismes actifs ce qui faciliterait la démarche de validation de lois de comportement dans un régime où une susceptibilité à la rupture fragile existe.

6 Références bibliographiques

Références

- G. Monnet, C. Domain, S. Queyreau, S. Naamane, and B. Devincre. Atomic and dislocation dynamics simulations of plastic deformation in reactor pressure vessel steel. *Journal of Nuclear Materials*, 394(2-3):174–181, November 2009.
- [2] Jean-Philippe Mathieu, Karim Inal, Sophie Berveiller, and Olivier Diard. A micromechanical interpretation of the temperature dependence of beremin model parameters for french rpv steel. *Journal of Nuclear Materials*, 406(1):97–112, November 2010.
- [3] C. Pokor, Y. Brechet, P. Dubuisson, J.-P. Massoud, and X. Averty. Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels : experimental investigation and modeling. part ii : Irradiation induced hardening. *Journal of Nuclear Materials*, 326(1):30–37, March 2004.
- [4] J. Crépin, T. Bretheau, and D. Caldemaison. Plastic deformation mechanisms of [beta] treated zirconium. *Acta Metallurgica et Materialia*, 43(10) :3709–3719, October 1995.

- [5] O. Diard, S. Leclercq, G. Rousselier, and G. Cailletaud. 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. *International Journal of Plasticity*, 21(4):691–722, April 2005.
- [6] S. Leclercq, D. Lidbury, S. Van Dyck, D. Moinereau, A. Alamo, and A. Al Mazouzi. Perform 60 prediction of the effects of radiation for reactor pressure vessel and in-core materials using multi-scale modelling -60 years foreseen plant lifetime. *Journal of Nuclear Materials*, 406(1):193–203, November 2010.
- [7] S. Queyreau, G. Monnet, and B. Devincre. Orowan strengthening and forest hardening superposition examined by dislocation dynamics simulations. *Acta Materialia*, 58(17):5586–5595, October 2010.
- [8] P. Franciosi, M. Berveiller, and A. Zaoui. Latent hardening in copper and aluminium single crystals. Acta Metallurgica, 28(3):273–283, March 1980.
- [9] Julia R. Greer, Warren C. Oliver, and William D. Nix. Size dependence of mechanical properties of gold at the micron scale in the absence of strain gradients. *Acta Materialia*, 53(6):1821–1830, April 2005.
- [10] M. Berveiller and A. Zaoui. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 26(5-6):325–344, October 1978.
- [11] X. Feaugas, P. Pilvin, and M. Clavel. Cyclic deformation behaviour of an gamma-gamma prime titanium alloy. internal stresses and micromechanic modelling. *Acta Materialia*, 45(7):2703–2714, July 1997.
- [12] A. Belkhabbaz, R. Brenner, N. Rupin, B. Bacroix, and J. Fonseca. Prediction of the overall behavior of a 3d microstructure of austenitic steel by using fft numerical scheme. *11th International Conference On the Mechanical Behavior of Materials (icm11)*, 10:1883–1888, 2011.
- [13] Samuel Forest, Fabrice Barbe, and Georges Cailletaud. Cosserat modelling of size effects in the mechanical behaviour of polycrystals and multi-phase materials. *International Journal of Solids and Structures*, 37(46-47):7105–7126, November 2000.
- [14] F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler, and D. Raabe. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling : Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 58(4):1152–1211, February 2010.
- [15] F. Latourte, N. Rupin, M. He, A. Parrot, and S. Leclercq. Full field measurements used for assessing industrial issues-two examples. *Procedia IUTAM*, 4(0):92–105, 2012.
- [16] B. Wattrisse, A. Chrysochoos, J. M. Muracciole, and M. Némoz-Gaillard. Kinematic manifestations of localisation phenomena in steels by digital image correlation. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 20(2):189–211, March 2001.
- [17] H.W. Schreier, M.A. Sutton, and J.J. Orteu. Image Correlation for Shape, Motion and Deformation Measurements : Basic Concepts, Theory and Applications. Springer London, Limited, 2009.
- [18] L. Méric, P. Poubanne, and G. Cailletaud. Single-crystal modeling for structural calculations .1. model presentation. JOURNAL OF ENGINEERING MATERIALS AND TECHNOLOGY-TRANSACTIONS OF THE ASME, 113(1):162–170, JAN 1991.
- [19] B. Jaoul. *Étude de la plasticité et application aux métaux*. Sciences de la matière. Presses de l'Ecole des Mines, 2008.
- [20] E. Rauch. *Etude de l'écrouissage des métaux Aspects microstructuraux et lois de comportement*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.
- [21] G. Monnet and L. Vincent. Crytalline plasticity constitutive equations for bcc steel at low temperature. *Mecanique & Industries*, 12(3):193–198, 2011.
- [22] N. Rupin, J-M. Proix, F. Latourte, and G. Monnet. Simulation de la réponse mécanique d'un acier inoxydable austénitique à l'aide de calculs cristallins. In *actes du congrès CSMA*, 2011.
- [23] G. Monnet, S. Naamane, and B. Devincre. Orowan strengthening at low temperatures in bcc materials studied by dislocation dynamics simulations. *Acta Materialia*, 59(2):451–461, January 2011.
- [24] S. Naamane, G. Monnet, and B. Devincre. Low temperature deformation in iron studied with dislocation dynamics simulations. *International Journal of Plasticity*, 26(1):84–92, January 2010.
- [25] www.code-aster.org.
- [26] M. H. H. Meuwissen, C. W. J. Oomens, F. P. T. Baaijens, R. Petterson, and J. D. Janssen. Determination of the elasto-plastic properties of aluminium using a mixed numerical-experimental method. *Journal of Materials Processing Technology*, 75(1-3) :204–211, March 1998.